

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7430486号
(P7430486)

(45)発行日 令和6年2月13日(2024.2.13)

(24)登録日 令和6年2月2日(2024.2.2)

(51)国際特許分類	F I	
C 0 7 D 263/57 (2006.01)	C 0 7 D 263/57	
C 0 7 D 413/10 (2006.01)	C 0 7 D 413/10	C S P
C 0 7 D 413/14 (2006.01)	C 0 7 D 413/14	
C 0 7 D 417/10 (2006.01)	C 0 7 D 417/10	
C 0 7 D 471/04 (2006.01)	C 0 7 D 471/04	1 0 3
請求項の数 6 (全91頁) 最終頁に続く		

(21)出願番号	特願2018-526435(P2018-526435)	(73)特許権者	000005315 保土谷化学工業株式会社 東京都港区東新橋一丁目9番2号
(86)(22)出願日	平成29年7月6日(2017.7.6)	(74)代理人	100087745 弁理士 清水 善廣
(86)国際出願番号	PCT/JP2017/024779	(74)代理人	100150968 弁理士 小松 悠有子
(87)国際公開番号	WO2018/008718	(72)発明者	榊澤 直朗 東京都中央区八重洲二丁目4番1号 保土谷化学工業株式会社内
(87)国際公開日	平成30年1月11日(2018.1.11)	(72)発明者	内藤 慧悟 東京都中央区八重洲二丁目4番1号 保土谷化学工業株式会社内
審査請求日	令和2年6月26日(2020.6.26)	(72)発明者	キム テヨン 東京都中央区八重洲二丁目4番1号 保土谷化学工業株式会社内
審判番号	不服2022-1492(P2022-1492/J1)		
審判請求日	令和4年2月1日(2022.2.1)		
(31)優先権主張番号	特願2016-134799(P2016-134799)		
(32)優先日	平成28年7月7日(2016.7.7)		
(33)優先権主張国・地域又は機関	日本国(JP)		

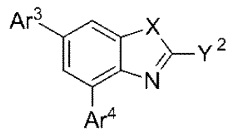
(54)【発明の名称】 ベンゾアゾール環構造を有する化合物および有機エレクトロルミネッセンス素子

(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記一般式(2)で表される、ベンゾアゾール環構造を有する化合物。

【化1】

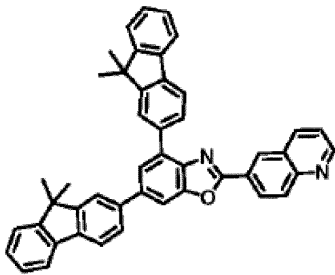


(2)

(式中、Ar³は、置換もしくは無置換のフェニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、スピロピフルオレニル基、インデニル基、ピレニル基、ペリレニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピリジル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、フリル基、ピロリル基、チエニル基、キノリル基、イソキノリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチエニル基、インドリル基、カルバゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾチアゾリル基、キノキサリニル基、ベンゾイミダゾリル基、ピラゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、ナフチリジニル基、フェナントロリニル基、アクリジニル基、もしくはカルポリニル基、またはアルキル基を表し、Ar⁴は、置換もしくは無置換のフェニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、スピロピフルオレニル基、インデニル基、ピレニル基、ペリレニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピリ

~~ジル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、フリル基、ピロリル基、チエニル基、キノリル基、イソキノリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチエニル基、インドリル基、カルバゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾチアゾリル基、キノキサリニル基、ベンゾイミダゾリル基、ピラゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、ナフチリジニル基、フェナントロリニル基、アクリジニル基、もしくはカルボリニル基を表し、 Ar^3 、 Ar^4 が置換基を有する場合の置換基は重水素原子、シアノ基、ニトロ基、ハロゲン原子、炭素原子数1ないし6の直鎖状もしくは分岐状のアルキルオキシ基、アルケニル基、アリールオキシ基、アリールアルキルオキシ基、フェニル基、ピフェニリル基、ターフェニリル基、ナフチル基、アントラセニル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、スピロピフルオレニル基、インデニル基、ピレニル基、ペリレニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピリジル基、チエニル基、フリル基、ピロリル基、キノリル基、イソキノリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチエニル基、インドリル基、カルバゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾチアゾリル基、キノキサリニル基、ベンゾイミダゾリル基、ピラゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、またはカルボリニル基である。 Y^2 は、置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の芳香族複素環基、または置換もしくは無置換の縮合多環芳香族基を表し、 Y^2 が置換基を有する場合の置換基は重水素原子、シアノ基、ニトロ基、ハロゲン原子、炭素原子数1ないし6の直鎖状もしくは分岐状のアルキルオキシ基、アルケニル基、アリールオキシ基、アリールアルキルオキシ基、フェニル基、ピフェニリル基、ターフェニリル基、ナフチル基、アントラセニル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、スピロピフルオレニル基、インデニル基、ピレニル基、ペリレニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピリジル基、チエニル基、フリル基、ピロリル基、キノリル基、イソキノリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチエニル基、インドリル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾチアゾリル基、キノキサリニル基、ベンゾイミダゾリル基、ピラゾリル基、ジベンゾフラニル基、またはジベンゾチエニル基である。 X は、酸素原子または硫黄原子を表す。ただし、下記構造式の化合物は除かれるものとする。)~~

【化2】



【請求項2】

一对の電極とその間に挟まれた少なくとも一層の有機層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子において、請求項1記載のベンゾアゾール環構造を有する化合物が、少なくとも1つの有機層の構成材料として用いられていることを特徴とする有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項3】

前記ベンゾアゾール環構造を有する化合物が用いられている有機層が電子輸送層である請求項2記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項4】

前記ベンゾアゾール環構造を有する化合物が用いられている有機層が正孔阻止層である請求項2記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項5】

前記ベンゾアゾール環構造を有する化合物が用いられている有機層が発光層である請求項2記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 6】

前記ベンゾアゾール環構造を有する化合物が用いられている有機層が電子注入層である請求項 2 記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【発明の詳細な説明】**【技術分野】****【0001】**

本発明は、各種の表示装置に好適な自発光素子である有機エレクトロルミネッセンス素子（以下、有機 EL 素子と略称する）に適した化合物と素子に関するものであり、詳しくはベンゾアゾール環構造を有する化合物と、該化合物を用いた有機 EL 素子に関するものである。

10

【背景技術】**【0002】**

有機 EL 素子は自己発光性素子であるため、液晶素子に比べて明るく視認性に優れ、鮮明な表示が可能であることから、活発な研究がなされてきた。

【0003】

1987年にイーストマン・コダック社の C. W. Tangらは各種の役割を各材料に分担した積層構造素子を開発することにより有機材料を用いた有機 EL 素子を実用的なものにした。彼らは電子を輸送することのできる蛍光体と正孔を輸送することのできる有機物とを積層し、両方の電荷を蛍光体の層の中に注入して発光させることにより、10V以下の電圧で1000cd/m²以上の高輝度が得られるようになった（例えば、特許文献1および特許文献2参照）。

20

【0004】

現在まで、有機 EL 素子の実用化のために多くの改良がなされ、積層構造の各種の役割をさらに細分化して、基板上に順次に、陽極、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層、陰極を設けた電界発光素子によって高効率と耐久性が達成されるようになってきた（例えば、非特許文献1参照）。

【0005】

また、発光効率のさらなる向上を目的として三重項励起子の利用が試みられ、燐光発光性化合物の利用が検討されている（例えば、非特許文献2参照）。

そして、熱活性化遅延蛍光（TADF）による発光を利用する素子も開発されている。2011年に九州大学の安達らは、熱活性化遅延蛍光材料を用いた素子によって5.3%の外部量子効率を実現させた（例えば、非特許文献3参照）。

30

【0006】

発光層は、一般的にホスト材料と称される電荷輸送性の化合物に、蛍光性化合物や燐光発光性化合物または遅延蛍光を放射する材料をドーブして作製することもできる。前記非特許文献に記載されているように、有機 EL 素子における有機材料の選択は、その素子の効率や耐久性など諸特性に大きな影響を与える（例えば、非特許文献2参照）。

【0007】

有機 EL 素子においては、両電極から注入された電荷が発光層で再結合して発光が得られるが、正孔、電子の両電荷を如何に効率良く発光層に受け渡すかが重要である。

40

電子注入性を高め、その移動度を高め、さらに陽極から注入された正孔をブロックする正孔阻止性を高め、正孔と電子が再結合する確率を向上させ、さらに発光層内で生成した励起子を閉じ込めることによって、高効率発光を得ることができる。そのため電子輸送材料の果たす役割は重要であり、電子注入性が高く、電子移動度が大きく、正孔阻止性が高く、さらには正孔に対する耐久性が高い電子輸送材料が求められている。

【0008】

また、素子の寿命に関しては材料の耐熱性やアモルファス性も重要である。耐熱性が低い材料では、素子駆動時に生じる熱により、低い温度でも熱分解が起こり、材料が劣化する。アモルファス性が低い材料では、短い時間でも薄膜の結晶化が起こり、素子が劣化してしまう。そのため使用する材料には耐熱性が高く、アモルファス性が良好な性質が求め

50

られる。

【0009】

代表的な発光材料であるトリス(8-ヒドロキシキノリン)アルミニウム(以後、Alq₃と略称する)は電子輸送材料としても一般的に用いられるが、電子移動が遅く、また仕事関数が5.6 eVなので正孔阻止性能が十分とは言えない。

【0010】

電子注入性や移動度などの特性を改良した化合物として、ベンゾトリアゾール構造を有する化合物が提案されているが(例えば、特許文献3)、これらの化合物を電子輸送層に用いた素子では、発光効率などの改良はされているものの、未だ十分とはいえず、さらなる低駆動電圧化や、さらなる高発光効率化が求められている。

10

【0011】

また、正孔阻止性に優れた電子輸送材料として、3-(4-ピフェニリル)-4-フェニル-5-(4-t-ブチルフェニル)-1,2,4-トリアゾール(以後、TAZと略称する)が提案されている(例えば、特許文献4参照)。

【0012】

TAZは仕事関数が6.6 eVと大きく正孔阻止能力が高いために、真空蒸着や塗布などによって作製される蛍光発光層や燐光発光層の、陰極側に積層する電子輸送性の正孔阻止層として使用され、有機EL素子の高効率化に寄与している(例えば、非特許文献4参照)。

【0013】

しかし電子輸送性が低いことがTAZにおける大きな課題であり、より電子輸送性の高い電子輸送材料と組み合わせて、有機EL素子を作製することが必要であった(例えば、非特許文献5参照)。

20

【0014】

また、BCPにおいても仕事関数が6.7 eVと大きく正孔阻止能力が高いものの、ガラス転移点(Tg)が83と低いことから、薄膜の安定性に乏しく、正孔阻止層として十分に機能しているとは言えない。

【0015】

いずれの材料も膜安定性が不足しており、もしくは正孔を阻止する機能が不十分である。有機EL素子の素子特性を改善させるために、電子の注入・輸送性能と正孔阻止能力に優れ、薄膜状態での安定性が高い有機化合物が求められている。

30

【先行技術文献】

【特許文献】

【0016】

【文献】特開平8-048656号公報

【文献】特許第3194657号公報

【文献】国際公開第2013/054764号

【文献】特許登録第2734341号

【文献】特開2010-83862公報

【文献】国際公開第2015/038503号

40

【非特許文献】

【0017】

【文献】応用物理学会第9回講習会予稿集55~61ページ(2001)

【文献】応用物理学会第9回講習会予稿集23~31ページ(2001)

【文献】Appl. Phys. Lett., 98, 083302(2011)

【文献】第50回応用物理学関係連合講演会28p-A-6講演予稿集1413ページ(2003)

【文献】応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会誌11巻1号13~19ページ(2000)

【文献】J. Org. Chem., 71, 1802(2006)

50

【文献】J. Org. Chem., 79, 6310 (2014)

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0018】

本発明の目的は高効率、高耐久性の有機EL素子用材料として、電子注入・輸送性能に優れ、正孔阻止能力を有し、薄膜状態での安定性が高い優れた特性を有する有機化合物を提供し、さらにこの化合物を用いて、高効率、高耐久性の有機EL素子を提供することにある。

【0019】

本発明が提供しようとする有機化合物が具備すべき物理的な特性としては、(1)電子の注入特性が良いこと、(2)電子の移動度が大きいこと、(3)正孔阻止能力に優れること、(4)薄膜状態が安定であること、(5)耐熱性に優れていることをあげることができる。また、本発明が提供しようとする有機EL素子が具備すべき物理的な特性としては、(1)発光効率および電力効率が高いこと、(2)発光開始電圧が低いこと、(3)実用駆動電圧が低いこと、(4)長寿命であること、をあげることができる。

10

【課題を解決するための手段】

【0020】

そこで本発明者らは上記の目的を達成するために、電子親和性であるベンゾアゾール環の窒素原子が金属に配位する能力を有していることと、耐熱性に優れているということに着目して、ベンゾアゾール環構造を有する化合物を設計して化学合成し、該化合物を用いて種々の有機EL素子を試作し、素子の特性評価を鋭意行った結果、本発明を完成するに至った。

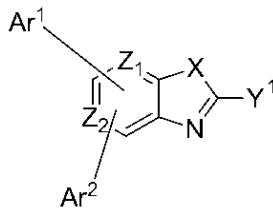
20

【0021】

1)すなわち本発明は、下記一般式(1)で表されるベンゾアゾール環構造を有する化合物である。

【0022】

【化1】



30

(1)

【0023】

(式中、Ar¹、Ar²は、相互に同一でも異なっていてもよく、水素原子、重水素原子、置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の芳香族複素環基、または置換もしくは無置換の縮合多環芳香族基、またはアルキル基を表し、Y¹は、置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の芳香族複素環基、置換もしくは無置換の縮合多環芳香族基、またはアルキル基を表し、Xは、酸素原子または硫黄原子を表し、Z₁、Z₂は、相互に同一でも異なっていてもよく、炭素原子または窒素原子を表す。)

40

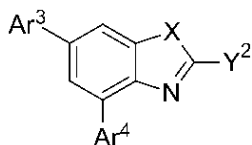
【0024】

2)また本発明は、下記一般式(2)で表される、上記1)記載のベンゾアゾール環構造を有する化合物である。

【0025】

50

【化2】



(2)

【0026】

(式中、Ar³、Ar⁴は、相互に同一でも異なっていてもよく、水素原子、重水素原子、置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の芳香族複素環基、置換もしくは無置換の縮合多環芳香族基、または置換もしくは無置換のアルキル基を表し、Y²は、置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の芳香族複素環基、置換もしくは無置換の縮合多環芳香族基、またはアルキル基を表し、Xは、酸素原子または硫黄原子を表す。)

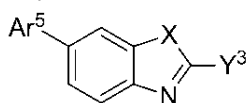
10

【0027】

3) また本発明は、下記一般式(3)で表される、上記1)記載のベンゾアゾール環構造を有する化合物である。

【0028】

【化3】



20

(3)

【0029】

(式中、Ar⁵は、水素原子、重水素原子、置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の芳香族複素環基、または置換もしくは無置換の縮合多環芳香族基を表し、Y³は、置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の芳香族複素環基、置換もしくは無置換の縮合多環芳香族基、またはアルキル基を表し、Xは、酸素原子または硫黄原子を表す。)

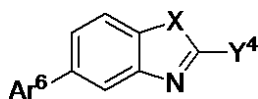
30

【0030】

4) また本発明は、下記一般式(4)で表される、上記1)記載のベンゾアゾール環構造を有する化合物である。

【0031】

【化4】



(4)

【0032】

(式中、Ar⁶は、水素原子、重水素原子、置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の芳香族複素環基、または置換もしくは無置換の縮合多環芳香族基を表し、Y⁴は、置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の芳香族複素環基、置換もしくは無置換の縮合多環芳香族基、またはアルキル基を表し、Xは、酸素原子または硫黄原子を表す。)

40

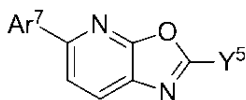
【0033】

5) また本発明は、下記一般式(5)で表される、上記1)記載のベンゾアゾール環構造を有する化合物である。

【0034】

50

【化5】



(5)

【0035】

(式中、Ar⁷は、水素原子、重水素原子、置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の芳香族複素環基、または置換もしくは無置換の縮合多環芳香族基を表し、Y⁵は、置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の芳香族複素環基、または置換もしくは無置換の縮合多環芳香族基を表す。)

10

【0036】

6) また本発明は、下記一般式(6)で表される、上記1)記載のベンゾアゾール環構造を有する化合物である。

【0037】

【化6】



20

(6)

【0038】

(式中、Ar⁸は、水素原子、重水素原子、置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の芳香族複素環基、または置換もしくは無置換の縮合多環芳香族基を表し、Y⁶は、置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の芳香族複素環基、または置換もしくは無置換の縮合多環芳香族基を表す。)

【0039】

7) また、本発明は、一对の電極とその間に挟まれた少なくとも一層の有機層を有する有機EL素子において、上記1)~6)のいずれか一項に記載のベンゾアゾール環構造を有する化合物が、少なくとも1つの有機層の構成材料として用いられていることを特徴とする有機EL素子である。

30

【0040】

8) また、本発明は、前記ベンゾアゾール環構造を有する化合物が用いられている有機層が電子輸送層である上記7)記載の有機EL素子である。

【0041】

9) また、本発明は、前記ベンゾアゾール環構造を有する化合物が用いられている有機層が正孔阻止層である上記7)記載の有機EL素子である。

【0042】

10) また、本発明は、前記ベンゾアゾール環構造を有する化合物が用いられている有機層が発光層である上記7)記載の有機EL素子である。

40

【0043】

11) また、本発明は、前記ベンゾアゾール環構造を有する化合物が用いられている有機層が電子注入層である上記7)記載の有機EL素子である。

【0044】

一般式(1)~(6)中のY¹~Y⁶およびAr¹~Ar⁸で表される「置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基」、「置換もしくは無置換の芳香族複素環基」または「置換もしくは無置換の縮合多環芳香族基」における「芳香族炭化水素基」、「芳香族複素環基」または「縮合多環芳香族基」としては、具体的に、フェニル基、ピフェニリル基、ターフェニリル基、ナフチル基、アントラセニル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、スピ

50

ロビフルオレニル基、インデニル基、ピレニル基、ペリレニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピリジル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、フリル基、ピロリル基、チエニル基、キノリル基、イソキノリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチエニル基、インドリル基、カルバゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾチアゾリル基、キノキサリニル基、ベンゾイミダゾリル基、ピラゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、ナフチリジニル基、フェナントロリニル基、アクリジニル基、およびカルボリニル基などの他に、炭素数 6 ~ 30 からなるアリール基、または炭素数 2 ~ 20 からなるヘテロアリール基から選択される。

【0045】

一般式(1)~(6)中の $Y^1 \sim Y^6$ および $Ar^1 \sim Ar^8$ で表される「置換芳香族炭化水素基」、「置換芳香族複素環基」または「置換縮合多環芳香族基」における「置換基」としては、具体的に、重水素原子、シアノ基、ニトロ基；フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子などのハロゲン原子；メチルオキシ基、エチルオキシ基、プロピルオキシ基などの炭素原子数 1 ないし 6 の直鎖状もしくは分岐状のアルキルオキシ基；ビニル基、アリル基などのアルケニル基；フェニルオキシ基、トリルオキシ基などのアリールオキシ基；ベンジルオキシ基、フェネチルオキシ基などのアリールアルキルオキシ基；フェニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、スピロビフルオレニル基、インデニル基、ピレニル基、ペリレニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基などの芳香族炭化水素基もしくは縮合多環芳香族基；ピリジル基、チエニル基、フリル基、ピロリル基、キノリル基、イソキノリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチエニル基、インドリル基、カルバゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾチアゾリル基、キノキサリニル基、ベンゾイミダゾリル基、ピラゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、カルボリニル基などの芳香族複素環基のような基をあげることができ、これらの置換基はさらに、前記例示した置換基が置換していてもよい。また、これらの置換基同士が単結合、置換もしくは無置換のメチレン基、酸素原子または硫黄原子を介して互いに結合して環を形成していてもよい。

【0046】

一般式(1)~(6)中の $Y^1 \sim Y^4$ で表される「アルキル基」としては、具体的に、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*tert*-ブチル基、*n*-ペンチル基、イソペンチル基、ネオペンチル基、*n*-ヘキシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、1-アダマンチル基、2-アダマンチル基、ビニル基、アリル基、イソプロペニル基、2-ブテニル基などをあげることができる。

【0047】

本発明の有機EL素子に好適に用いられる、前記一般式(1)で表されるベンゾアゾール環構造を有する化合物は、有機EL素子の電子注入層または電子輸送層の構成材料として使用することができる。電子の移動度が高く正孔注入層または電子輸送層の材料として好ましい化合物である。

【0048】

本発明の有機EL素子は電子の注入・輸送性能、薄膜の安定性や耐久性に優れた有機EL素子用の材料を使用しているため、従来の有機EL素子に比べて、電子輸送層から発光層への電子輸送効率が向上し、発光効率が向上するとともに、駆動電圧が低下して、有機EL素子の耐久性を向上させることができる。

高効率、低駆動電圧、長寿命の有機EL素子を実現することが可能となった。

【発明の効果】

【0049】

本発明の有機EL素子は電子の注入・輸送の役割を効果的に発現できる特定のベンゾアゾール環構造を有する化合物を選択したことにより、電子輸送層から発光層へ電子を効率良く注入・輸送できることによって、電子の注入・輸送性能、薄膜の安定性や耐久性に優れ、高効率、低駆動電圧、長寿命の有機EL素子を実現することができる。

本発明によれば、従来の有機EL素子の発光効率および駆動電圧、そして耐久性を改良

10

20

30

40

50

することができる。

【図面の簡単な説明】

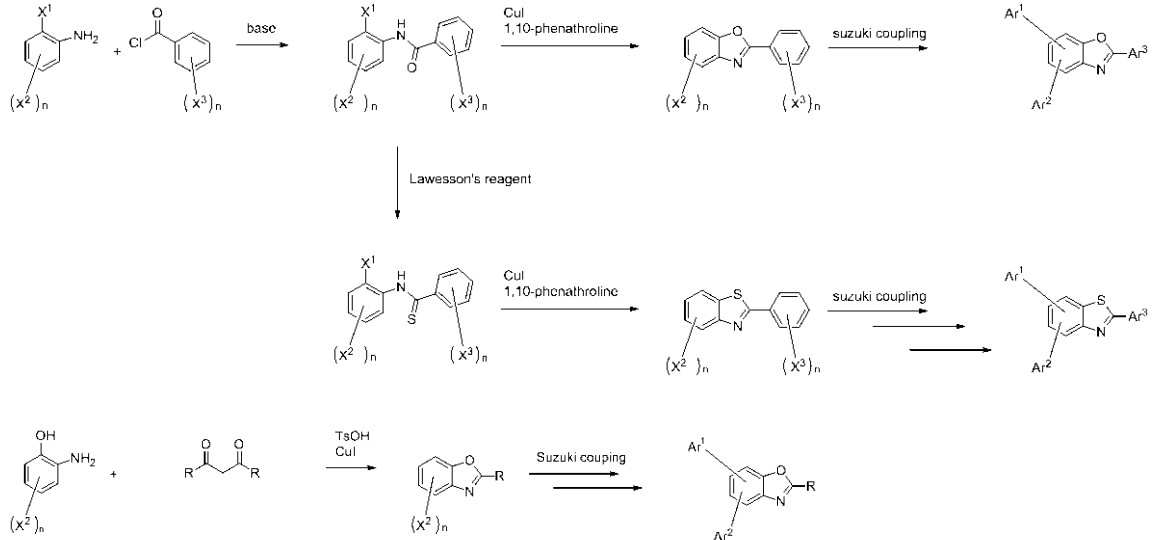
【0050】

【図1】実施例29～43、比較例1～2の有機EL素子構成を示した図である。

【発明を実施するための形態】

【0051】

本発明のベンゾアゾール環構造を有する化合物は新規な化合物である。これら化合物は例えば以下のように、それ自体公知の方法に準じて合成することができる（例えば、特許文献5、6、非特許文献6、7参照）。



10

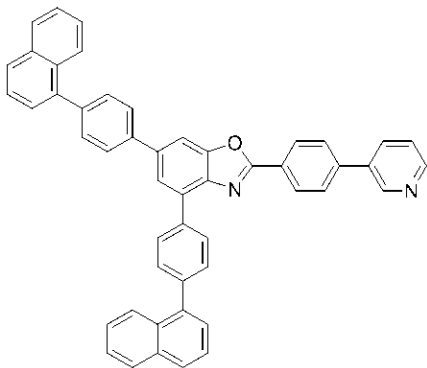
20

【0052】

本発明の有機EL素子に好適に用いられる、前記一般式(1)で表されるベンゾオキサゾール化合物の中で、好ましい化合物の具体例を以下に示すが、これらの化合物に限定されるものではない。

【0053】

【化7】



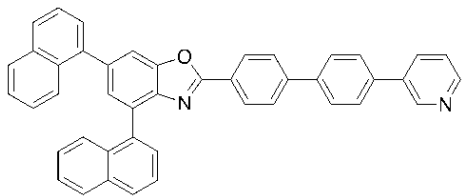
40

(1 - 1)

【0054】

50

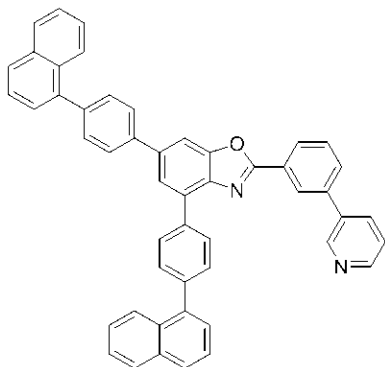
【化 8】



(1 - 2)

【 0 0 5 5 】

【化 9】



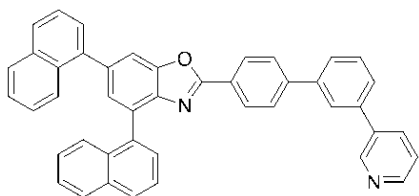
10

20

(1 - 3)

【 0 0 5 6 】

【化 1 0】

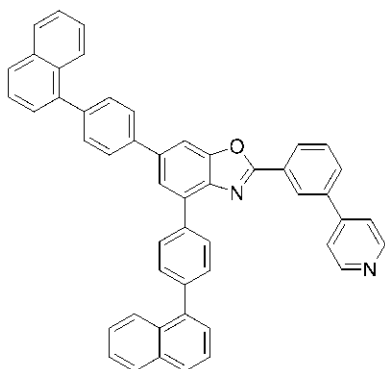


30

(1 - 4)

【 0 0 5 7 】

【化 1 1】



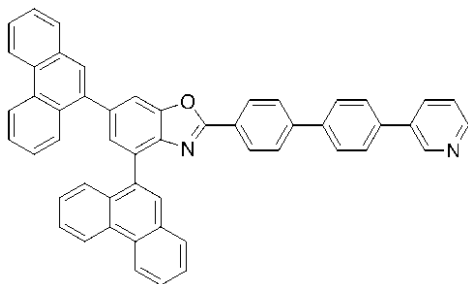
40

(1 - 5)

【 0 0 5 8 】

50

【化 1 2】

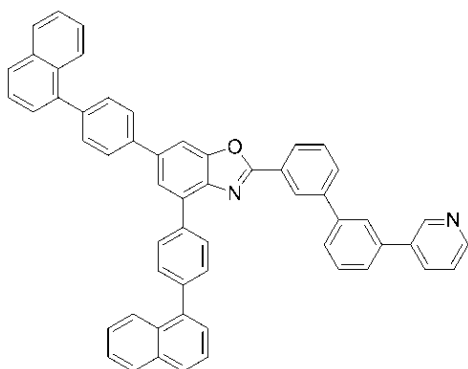


10

(1 - 6)

【 0 0 5 9】

【化 1 3】

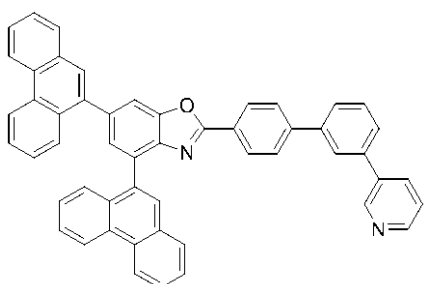


20

(1 - 7)

【 0 0 6 0】

【化 1 4】

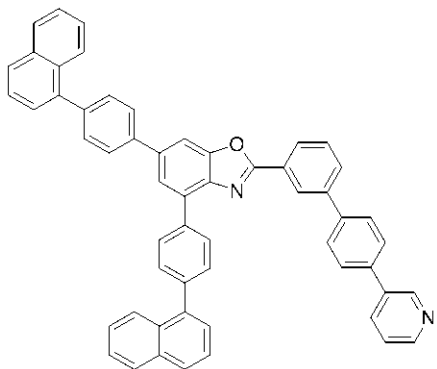


30

(1 - 8)

【 0 0 6 1】

【化 1 5】



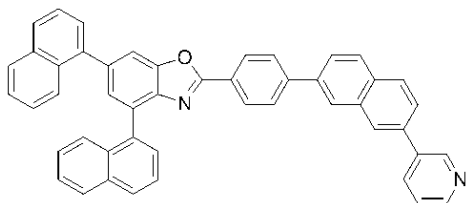
40

50

(1 - 9)

【 0 0 6 2 】

【 化 1 6 】

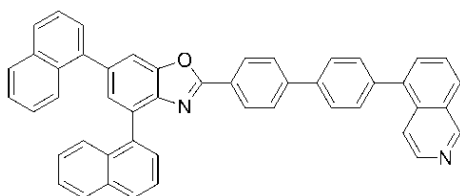


(1 - 1 0)

10

【 0 0 6 3 】

【 化 1 7 】

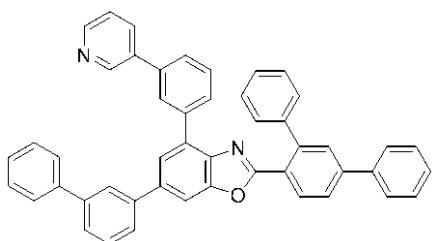


(1 - 1 1)

20

【 0 0 6 4 】

【 化 1 8 】

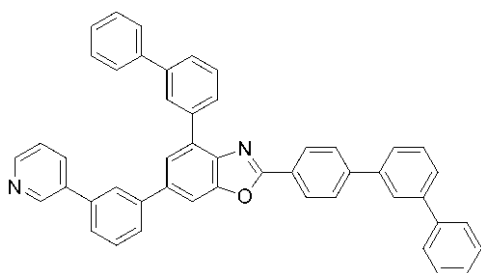


(1 - 1 2)

30

【 0 0 6 5 】

【 化 1 9 】

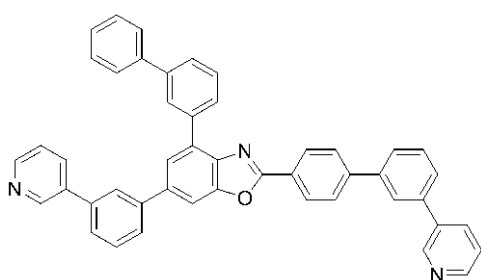


(1 - 1 3)

40

【 0 0 6 6 】

【 化 2 0 】

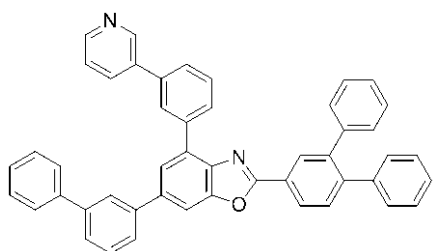


50

(1 - 1 4)

【 0 0 6 7 】

【 化 2 1 】

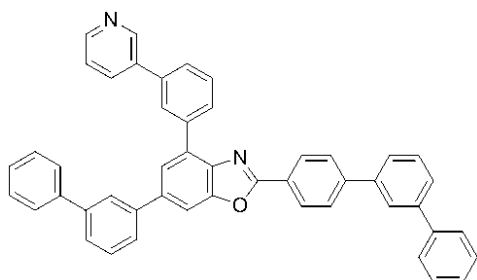


10

(1 - 1 5)

【 0 0 6 8 】

【 化 2 2 】

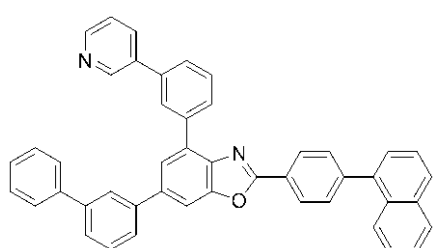


20

(1 - 1 6)

【 0 0 6 9 】

【 化 2 3 】

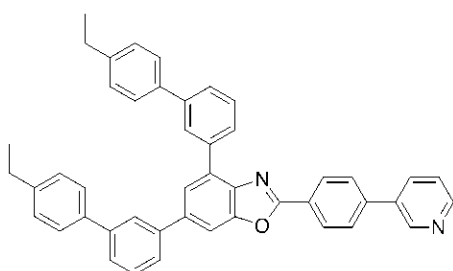


30

(1 - 1 7)

【 0 0 7 0 】

【 化 2 4 】



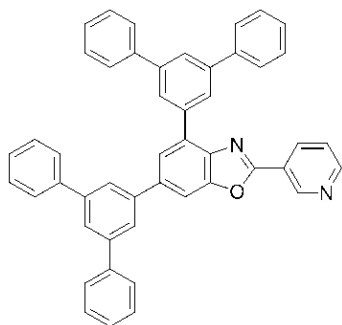
40

(1 - 1 8)

【 0 0 7 1 】

50

【化 2 5】

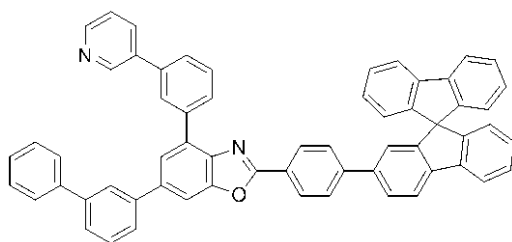


10

(1 - 1 9)

【 0 0 7 2】

【化 2 6】

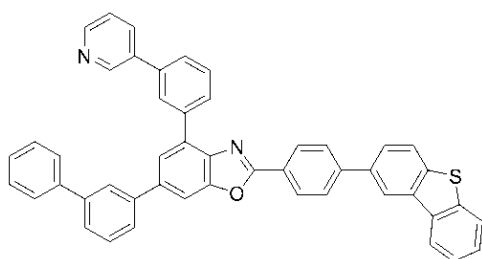


20

(1 - 2 0)

【 0 0 7 3】

【化 2 7】

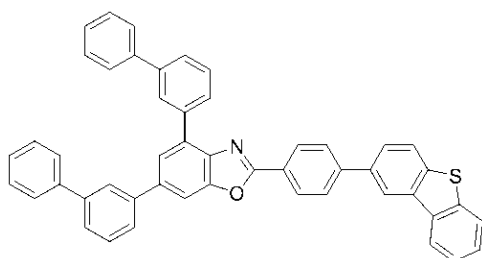


30

(1 - 2 1)

【 0 0 7 4】

【化 2 8】



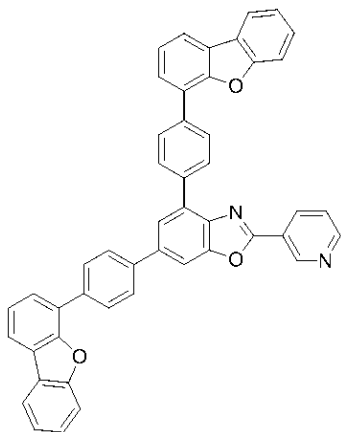
40

(1 - 2 2)

【 0 0 7 5】

50

【化 2 9】

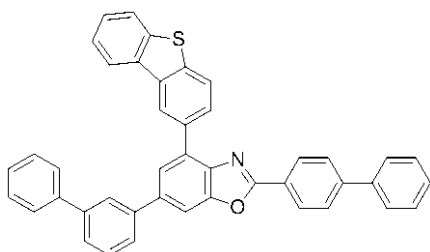


10

(1 - 2 3)

【 0 0 7 6】

【化 3 0】

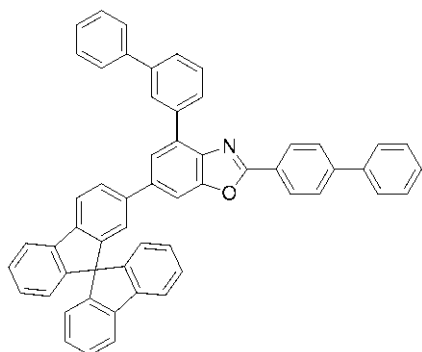


20

(1 - 2 4)

【 0 0 7 7】

【化 3 1】

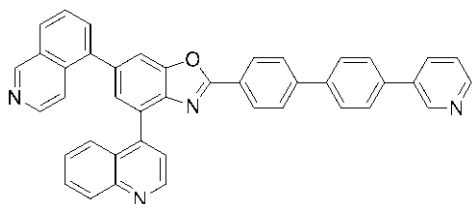


30

(1 - 2 5)

【 0 0 7 8】

【化 3 2】



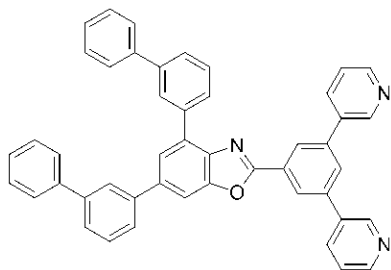
40

(1 - 2 6)

【 0 0 7 9】

50

【化 3 3】

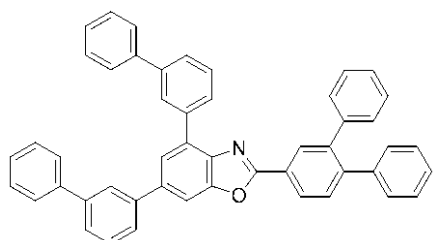


(1 - 2 7)

10

【 0 0 8 0】

【化 3 4】

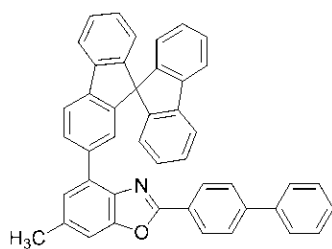


(1 - 2 8)

20

【 0 0 8 1】

【化 3 5】

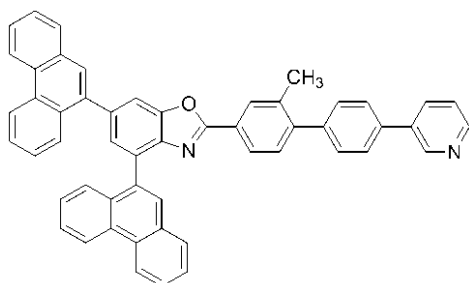


(1 - 2 9)

30

【 0 0 8 2】

【化 3 6】



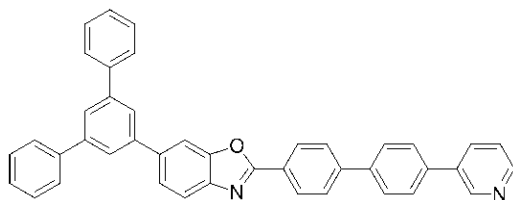
(1 - 3 0)

40

【 0 0 8 3】

50

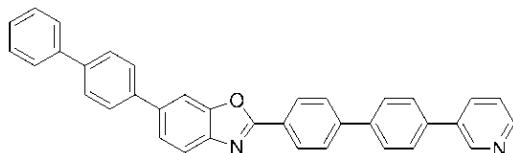
【化37】



(1 - 3 1)

【0084】

【化38】

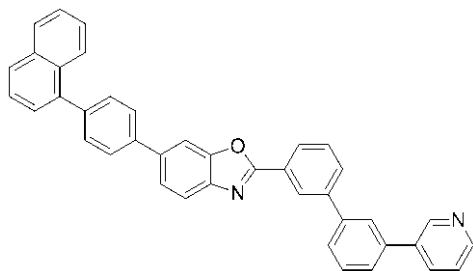


10

(1 - 3 2)

【0085】

【化39】

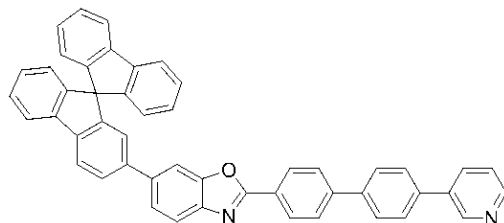


20

(1 - 3 3)

【0086】

【化40】

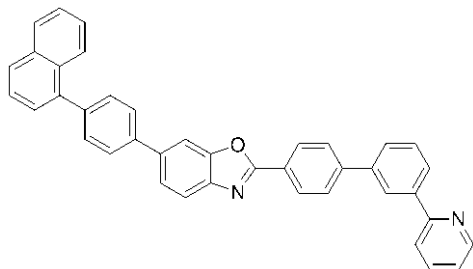


30

(1 - 3 4)

【0087】

【化41】



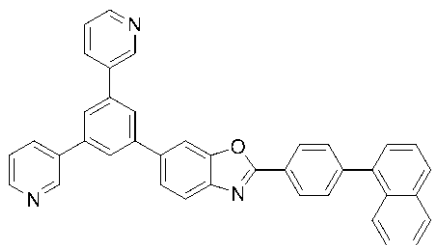
40

(1 - 3 5)

【0088】

50

【化 4 2】

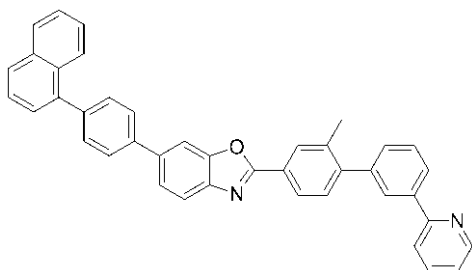


(1 - 3 6)

10

【 0 0 8 9 】

【化 4 3】

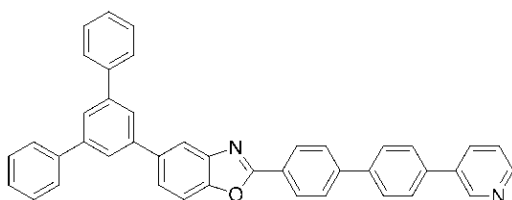


(1 - 3 7)

20

【 0 0 9 0 】

【化 4 4】

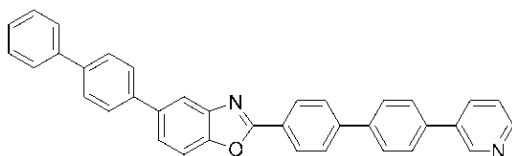


(1 - 3 8)

30

【 0 0 9 1 】

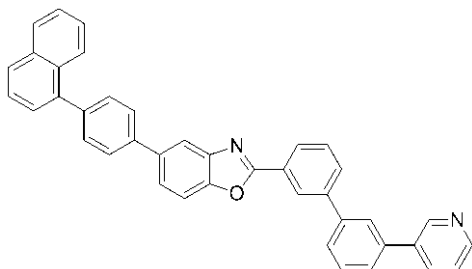
【化 4 5】



(1 - 3 9)

【 0 0 9 2 】

【化 4 6】



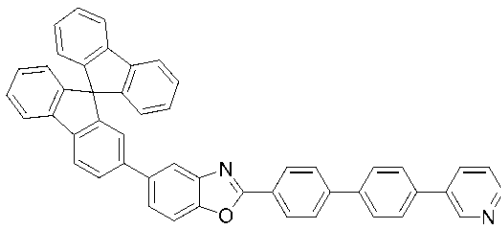
(1 - 4 0)

40

【 0 0 9 3 】

50

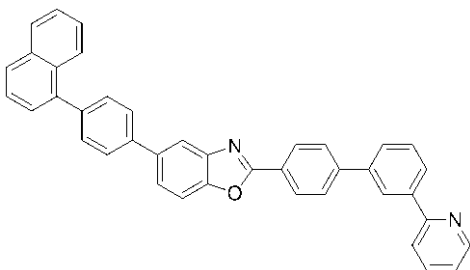
【化 4 7】



(1 - 4 1)

【 0 0 9 4 】

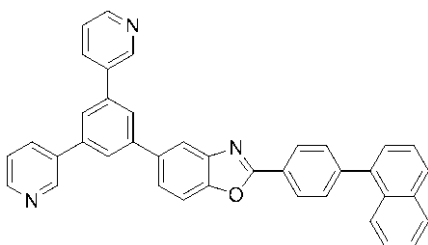
【化 4 8】



(1 - 4 2)

【 0 0 9 5 】

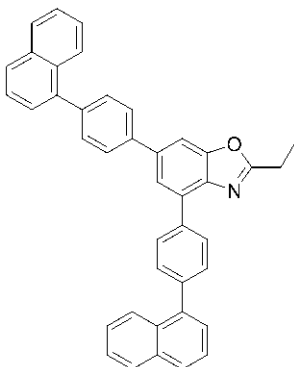
【化 4 9】



(1 - 4 3)

【 0 0 9 6 】

【化 5 0】



(1 - 4 4)

【 0 0 9 7 】

10

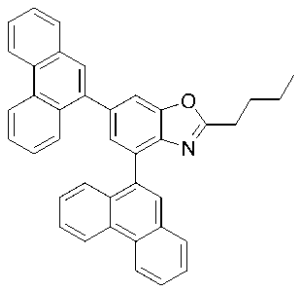
20

30

40

50

【化 5 1】

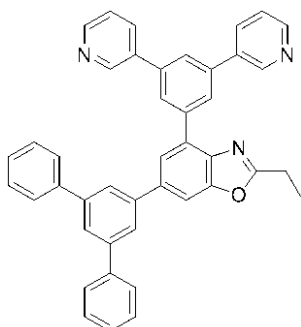


10

(1 - 4 5)

【 0 0 9 8】

【化 5 2】

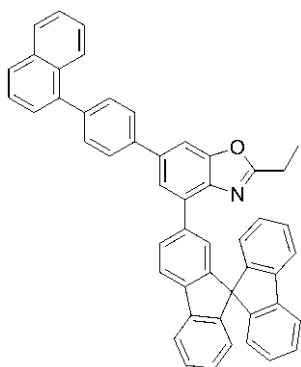


20

(1 - 4 6)

【 0 0 9 9】

【化 5 3】



30

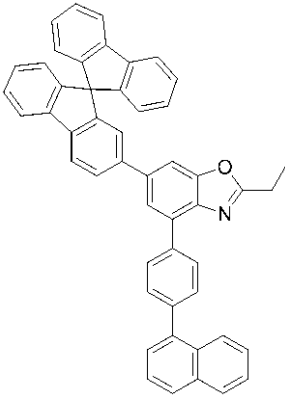
(1 - 4 7)

【 0 1 0 0】

40

50

【化 5 4】

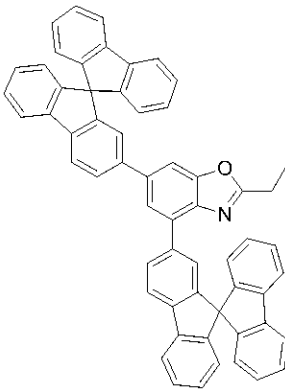


10

(1 - 4 8)

【 0 1 0 1】

【化 5 5】

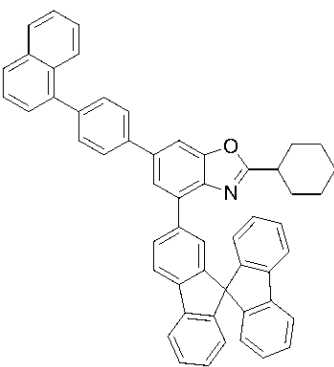


20

(1 - 4 9)

【 0 1 0 2】

【化 5 6】



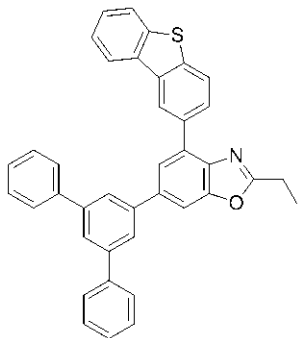
30

(1 - 5 0)

【 0 1 0 3】

50

【化 5 7】

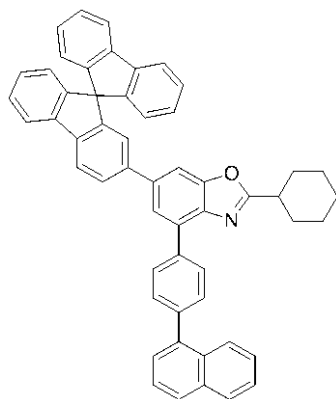


10

(1 - 5 1)

【 0 1 0 4】

【化 5 8】

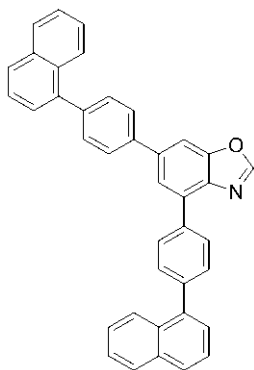


20

(1 - 5 2)

【 0 1 0 5】

【化 5 9】

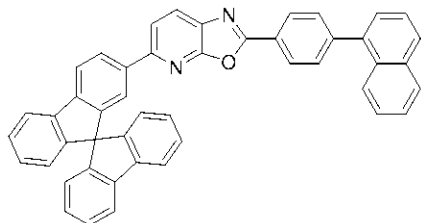


30

(1 - 5 3)

【 0 1 0 6】

【化 6 0】

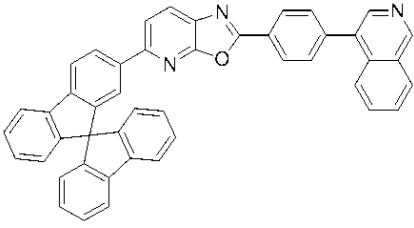


50

(1 - 5 4)

【 0 1 0 7 】

【 化 6 1 】

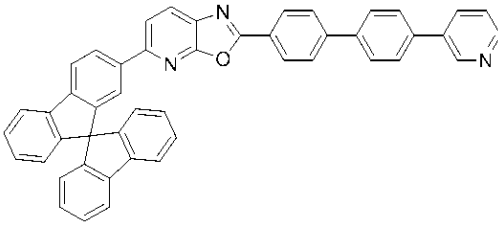


(1 - 5 5)

10

【 0 1 0 8 】

【 化 6 2 】

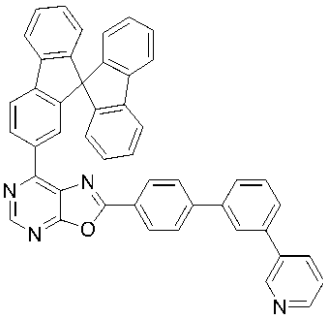


(1 - 5 6)

20

【 0 1 0 9 】

【 化 6 3 】

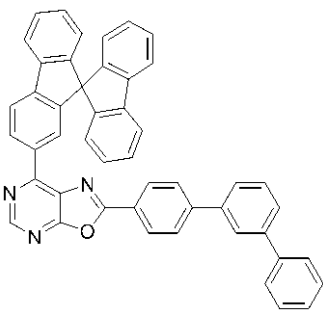


30

(1 - 5 7)

【 0 1 1 0 】

【 化 6 4 】



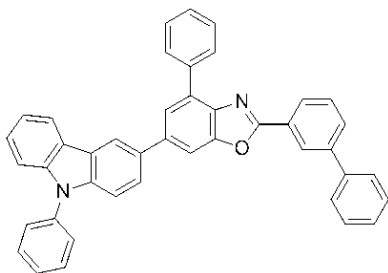
40

(1 - 5 8)

【 0 1 1 1 】

50

【化 6 5】

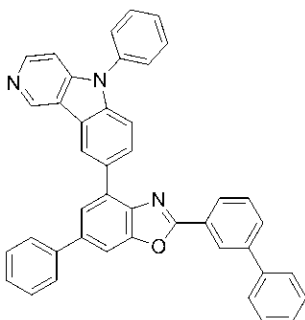


(1 - 5 9)

10

【 0 1 1 2】

【化 6 6】

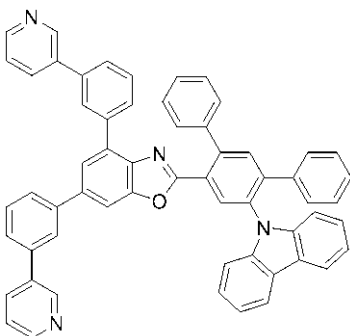


20

(1 - 6 0)

【 0 1 1 3】

【化 6 7】

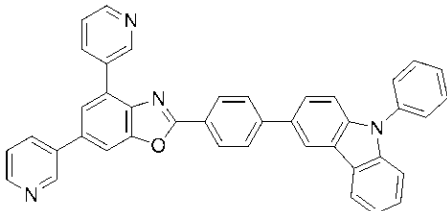


30

(1 - 6 1)

【 0 1 1 4】

【化 6 8】



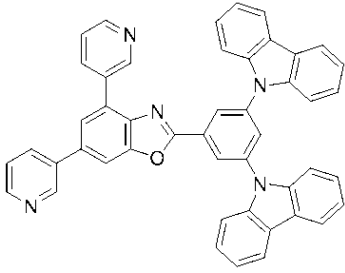
40

(1 - 6 2)

【 0 1 1 5】

50

【化 6 9】

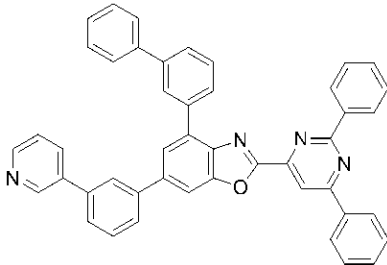


(1 - 6 3)

10

【 0 1 1 6】

【化 7 0】

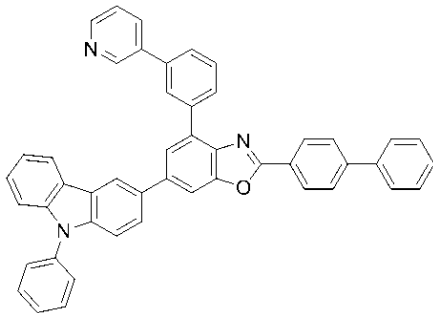


(1 - 6 4)

20

【 0 1 1 7】

【化 7 1】

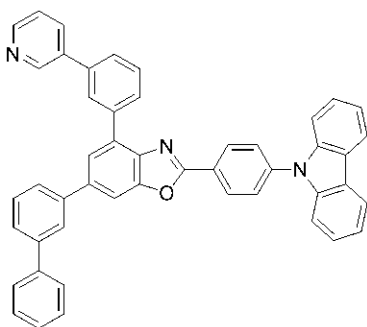


(1 - 6 5)

30

【 0 1 1 8】

【化 7 2】



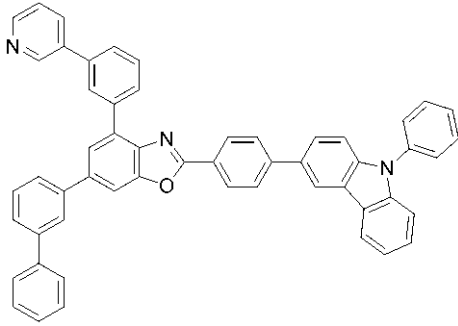
(1 - 6 6)

40

【 0 1 1 9】

50

【化73】

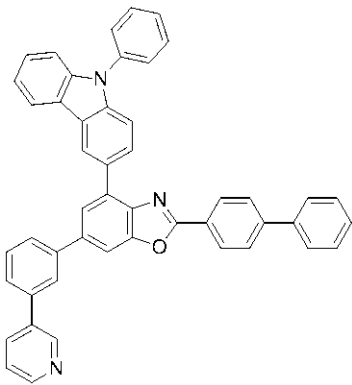


10

(1 - 6 7)

【0120】

【化74】

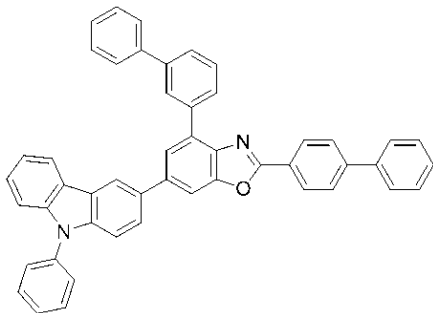


20

(1 - 6 8)

【0121】

【化75】

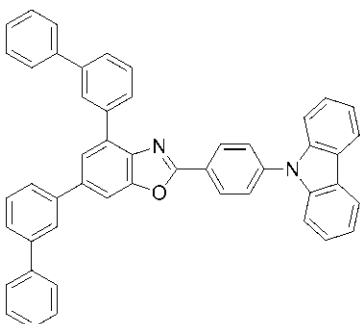


30

(1 - 6 9)

【0122】

【化76】



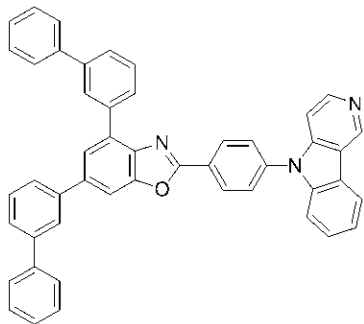
40

50

(1 - 7 0)

【 0 1 2 3 】

【 化 7 7 】

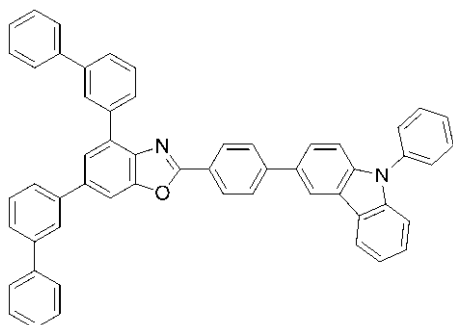


10

(1 - 7 1)

【 0 1 2 4 】

【 化 7 8 】

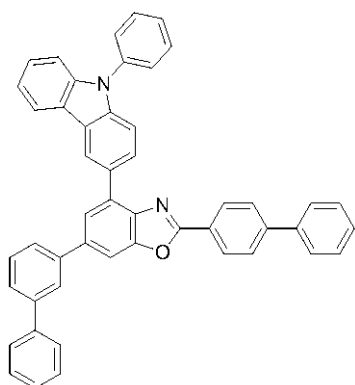


20

(1 - 7 2)

【 0 1 2 5 】

【 化 7 9 】



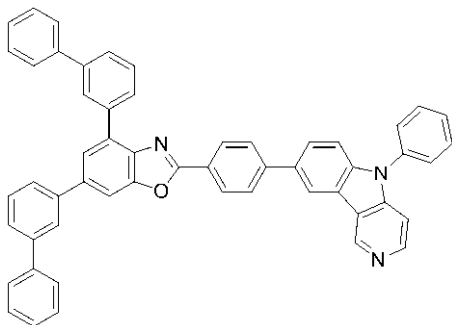
30

(1 - 7 3)

【 0 1 2 6 】

40

【化 8 0】

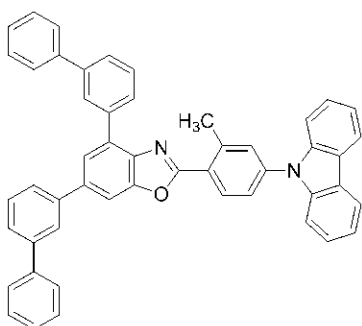


10

(1 - 7 4)

【 0 1 2 7】

【化 8 1】

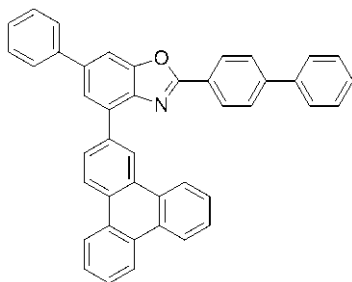


20

(1 - 7 5)

【 0 1 2 8】

【化 8 2】

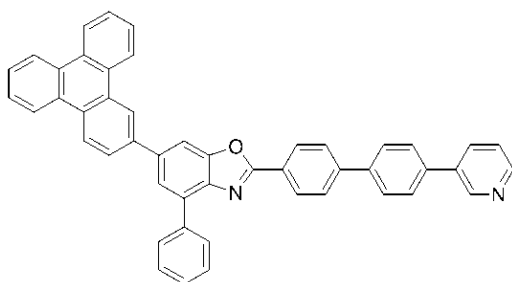


30

(1 - 7 6)

【 0 1 2 9】

【化 8 3】



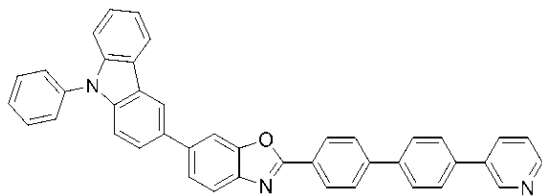
40

(1 - 7 7)

【 0 1 3 0】

50

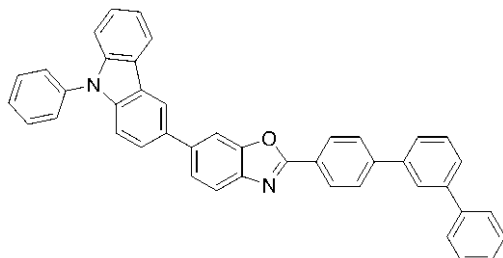
【化 8 4】



(1 - 7 8)

【 0 1 3 1】

【化 8 5】

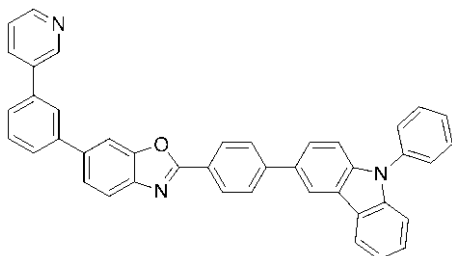


10

(1 - 7 9)

【 0 1 3 2】

【化 8 6】

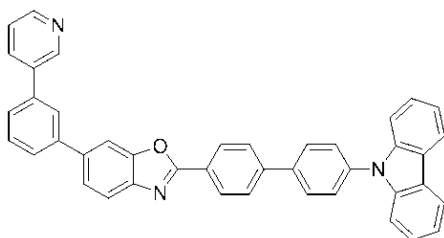


20

(1 - 8 0)

【 0 1 3 3】

【化 8 7】

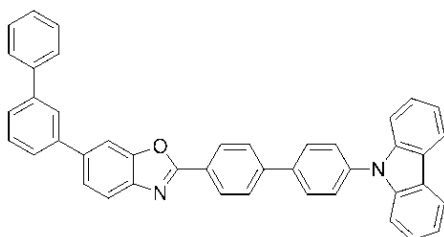


30

(1 - 8 1)

【 0 1 3 4】

【化 8 8】



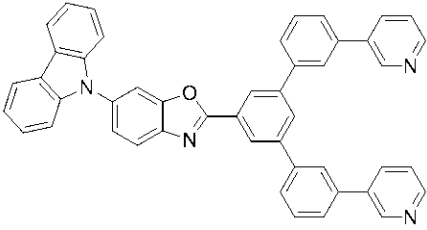
40

(1 - 8 2)

50

【 0 1 3 5 】

【 化 8 9 】

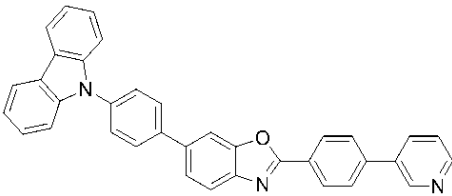


(1 - 8 3)

10

【 0 1 3 6 】

【 化 9 0 】

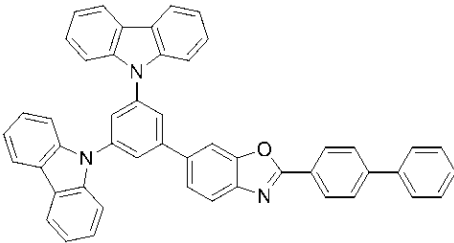


(1 - 8 4)

20

【 0 1 3 7 】

【 化 9 1 】

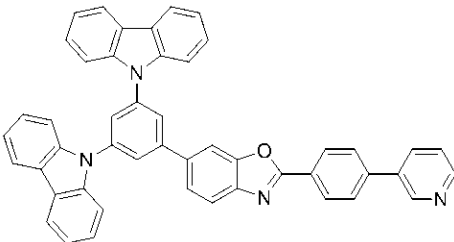


(1 - 8 5)

30

【 0 1 3 8 】

【 化 9 2 】

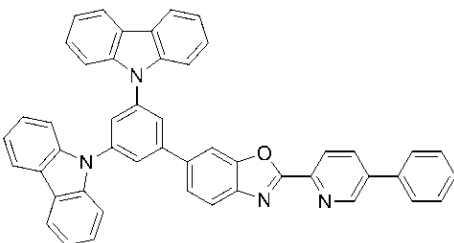


(1 - 8 6)

40

【 0 1 3 9 】

【 化 9 3 】

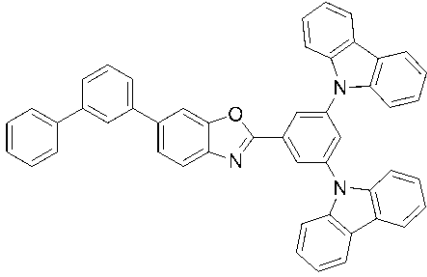


50

(1 - 8 7)

【 0 1 4 0 】

【 化 9 4 】

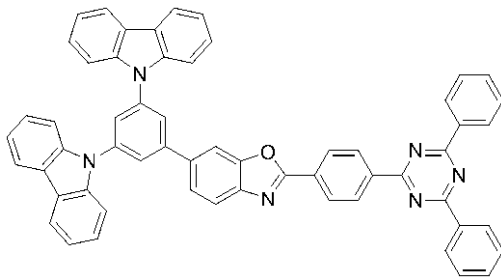


10

(1 - 8 8)

【 0 1 4 1 】

【 化 9 5 】

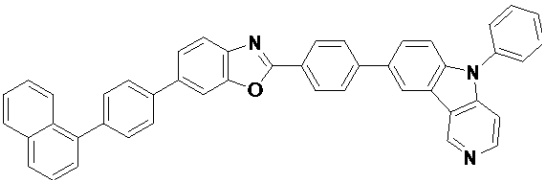


20

(1 - 8 9)

【 0 1 4 2 】

【 化 9 6 】

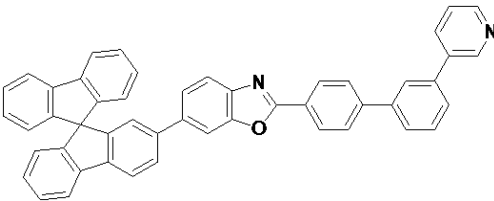


30

(1 - 9 0)

【 0 1 4 3 】

【 化 9 7 】

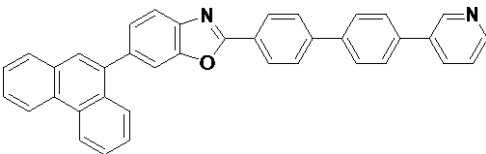


40

(1 - 9 1)

【 0 1 4 4 】

【 化 9 8 】

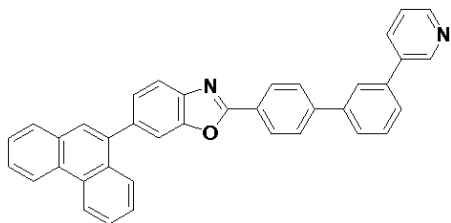


(1 - 9 2)

【 0 1 4 5 】

50

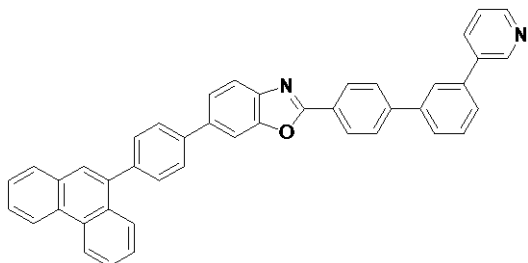
【化 9 9】



(1 - 9 3)

【 0 1 4 6】

【化 1 0 0】

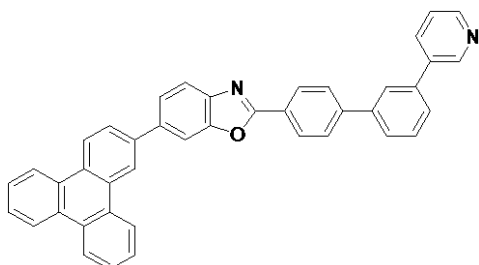


10

(1 - 9 4)

【 0 1 4 7】

【化 1 0 1】

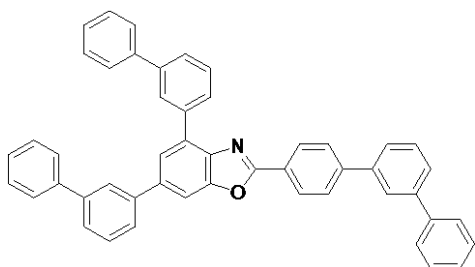


20

(1 - 9 5)

【 0 1 4 8】

【化 1 0 2】



30

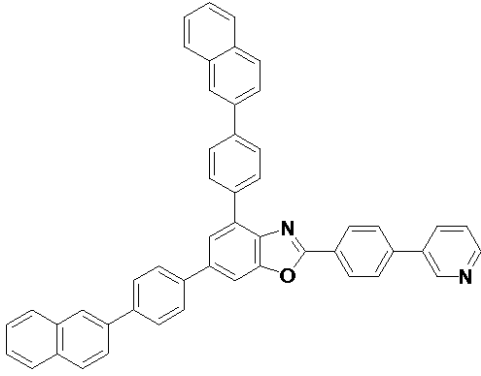
(1 - 9 6)

【 0 1 4 9】

40

50

【化103】

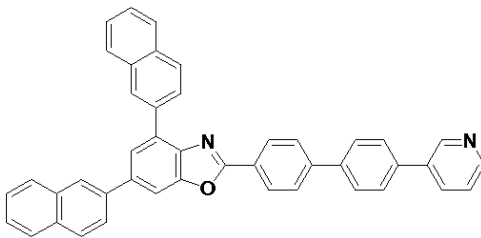


10

(1 - 9 7)

【0150】

【化104】

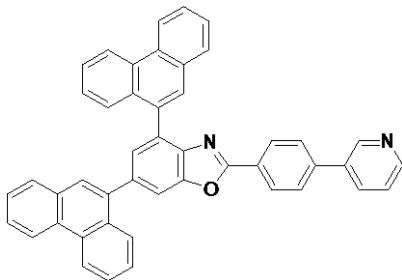


20

(1 - 9 8)

【0151】

【化105】

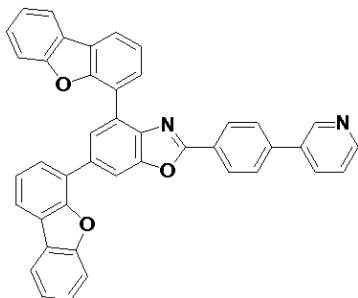


30

(1 - 9 9)

【0152】

【化106】



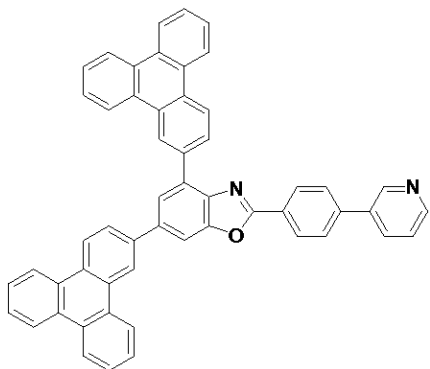
40

(1 - 1 0 0)

【0153】

50

【化107】

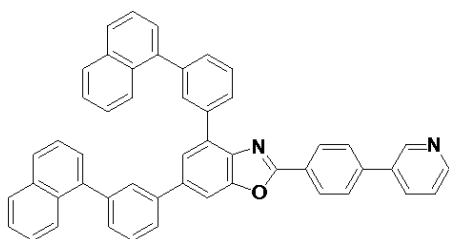


10

(1 - 1 0 1)

【0154】

【化108】

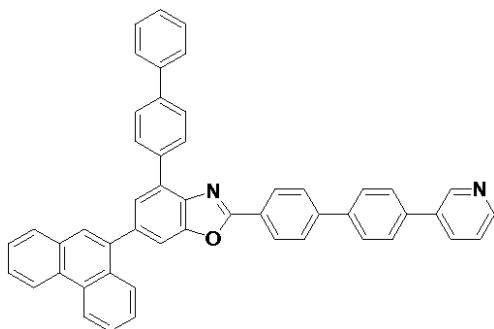


20

(1 - 1 0 2)

【0155】

【化109】

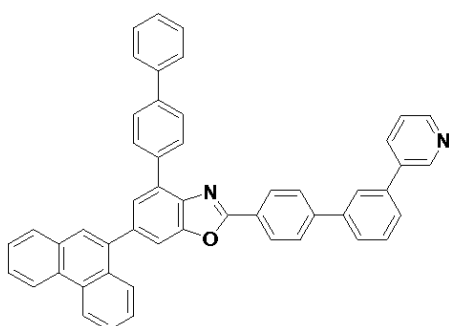


30

(1 - 1 0 3)

【0156】

【化110】



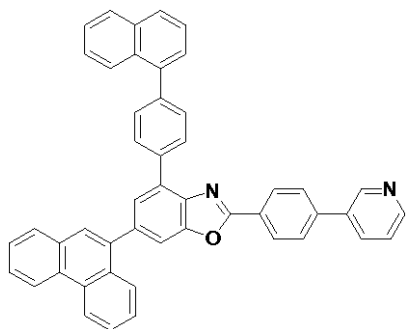
40

(1 - 1 0 4)

【0157】

50

【化 1 1 1】

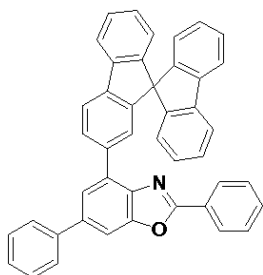


10

(1 - 1 0 5)

【 0 1 5 8】

【化 1 1 2】

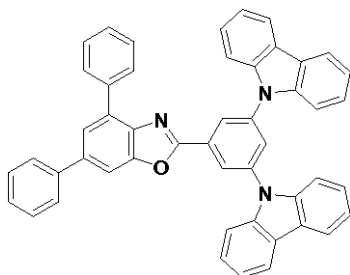


20

(1 - 1 0 6)

【 0 1 5 9】

【化 1 1 3】

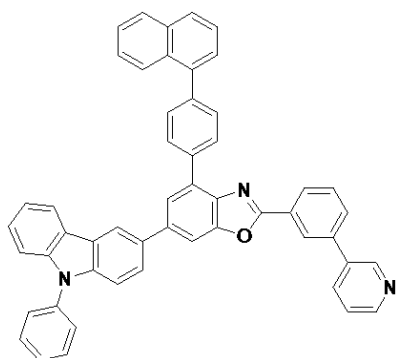


30

(1 - 1 0 7)

【 0 1 6 0】

【化 1 1 4】



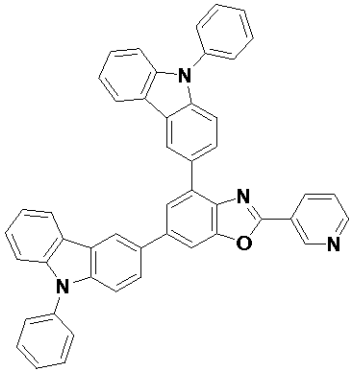
40

(1 - 1 0 8)

【 0 1 6 1】

50

【化 1 1 5】

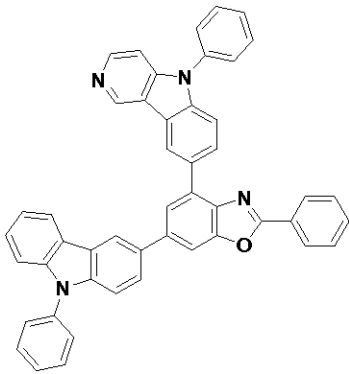


10

(1 - 1 0 9)

【 0 1 6 2】

【化 1 1 6】

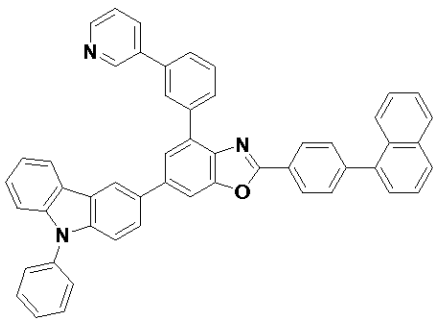


20

(1 - 1 1 0)

【 0 1 6 3】

【化 1 1 7】

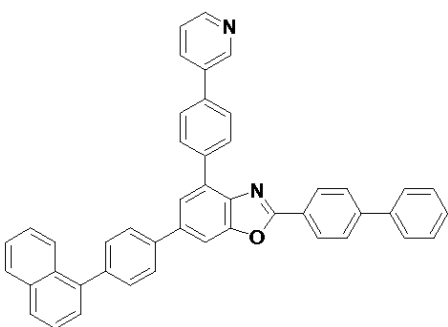


30

(1 - 1 1 1)

【 0 1 6 4】

【化 1 1 8】

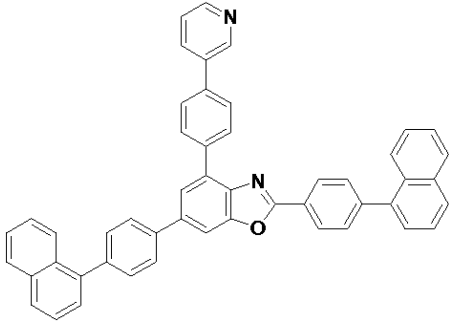


50

(1 - 1 1 2)

【 0 1 6 5 】

【 化 1 1 9 】

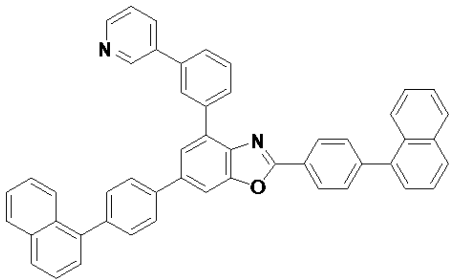


10

(1 - 1 1 3)

【 0 1 6 6 】

【 化 1 2 0 】

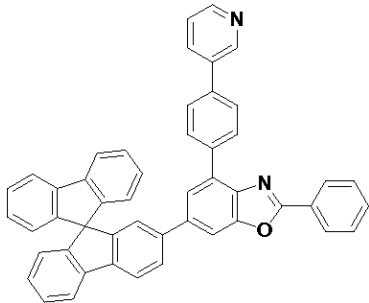


20

(1 - 1 1 4)

【 0 1 6 7 】

【 化 1 2 1 】

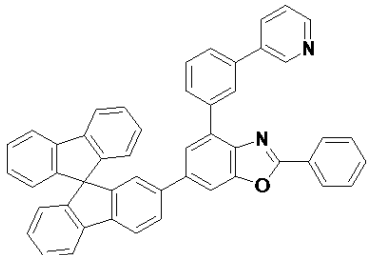


30

(1 - 1 1 5)

【 0 1 6 8 】

【 化 1 2 2 】



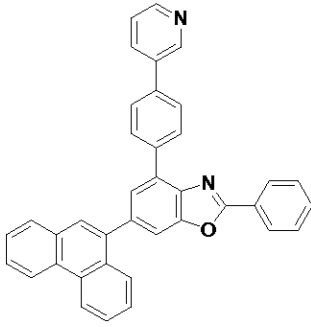
40

(1 - 1 1 6)

【 0 1 6 9 】

50

【化 1 2 3】

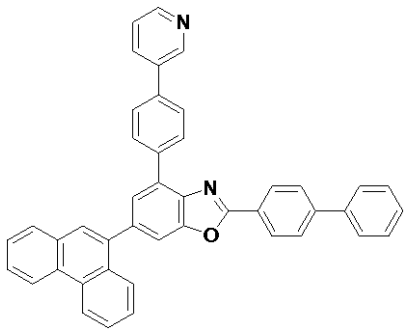


10

(1 - 1 1 7)

【 0 1 7 0】

【化 1 2 4】

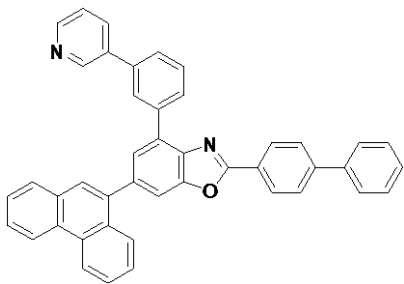


20

(1 - 1 1 8)

【 0 1 7 1】

【化 1 2 5】

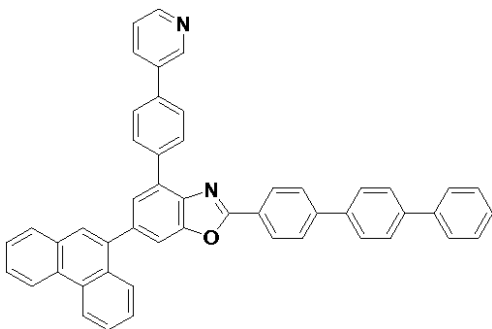


30

(1 - 1 1 9)

【 0 1 7 2】

【化 1 2 6】



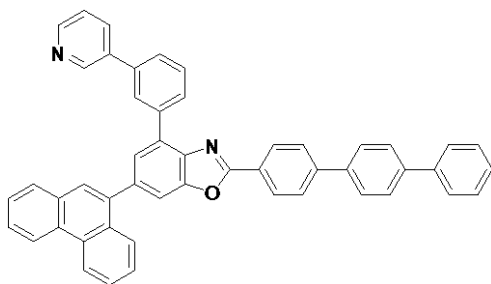
40

(1 - 1 2 0)

【 0 1 7 3】

50

【化 1 2 7】

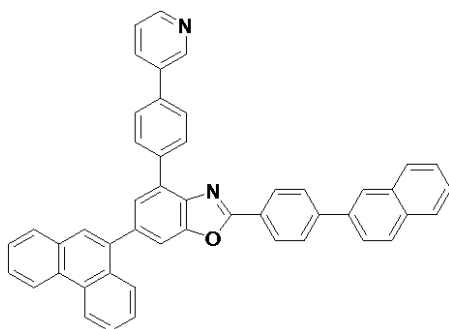


(1 - 1 2 1)

10

【 0 1 7 4】

【化 1 2 8】

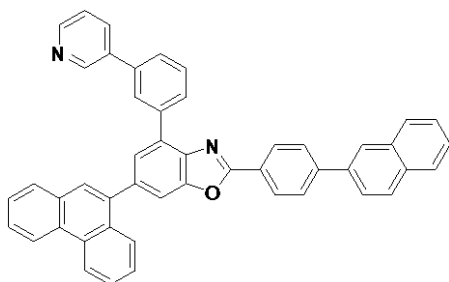


20

(1 - 1 2 2)

【 0 1 7 5】

【化 1 2 9】

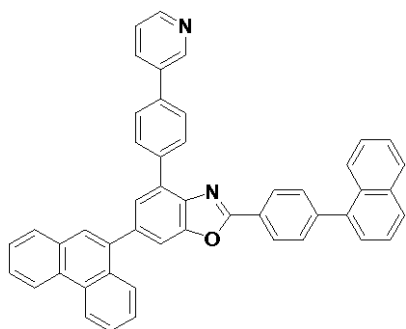


30

(1 - 1 2 3)

【 0 1 7 6】

【化 1 3 0】



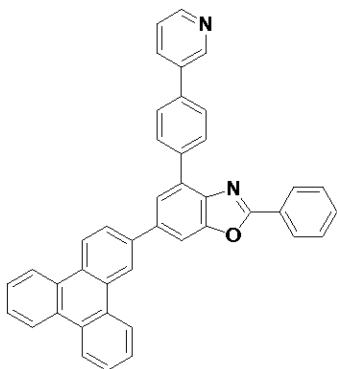
40

(1 - 1 2 4)

【 0 1 7 7】

50

【化 1 3 1】

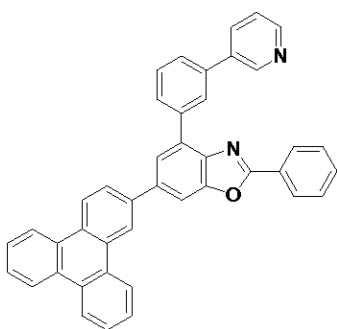


10

(1 - 1 2 5)

【 0 1 7 8 】

【化 1 3 2】

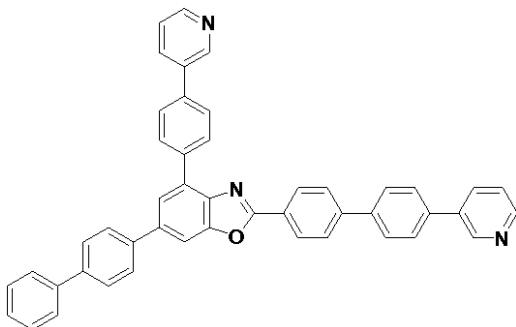


20

(1 - 1 2 6)

【 0 1 7 9 】

【化 1 3 3】

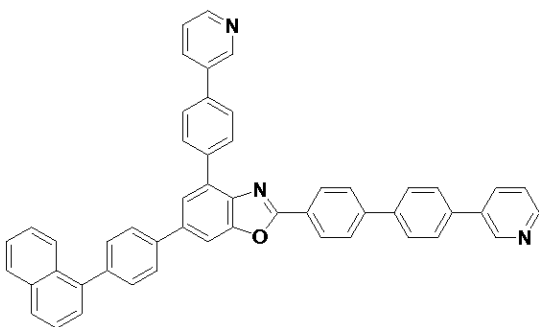


30

(1 - 1 2 7)

【 0 1 8 0 】

【化 1 3 4】

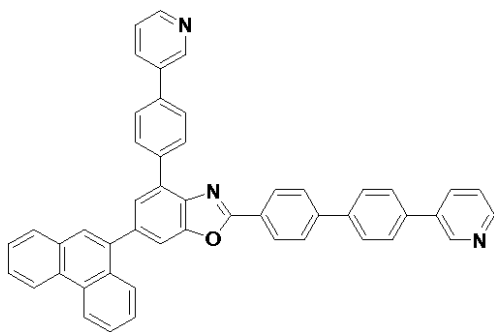


50

(1 - 1 2 8)

【 0 1 8 1 】

【 化 1 3 5 】

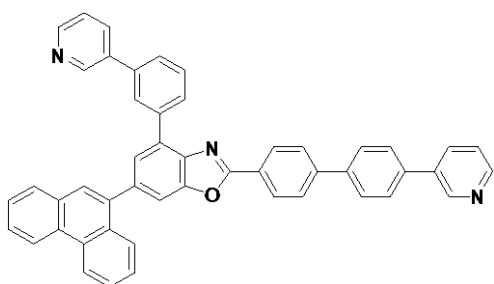


10

(1 - 1 2 9)

【 0 1 8 2 】

【 化 1 3 6 】

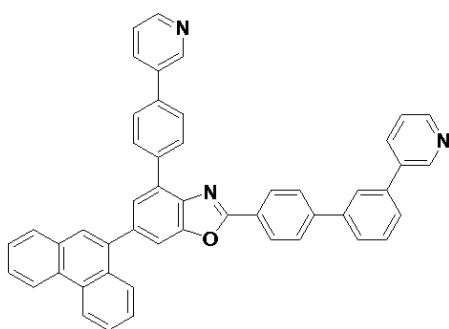


20

(1 - 1 3 0)

【 0 1 8 3 】

【 化 1 3 7 】

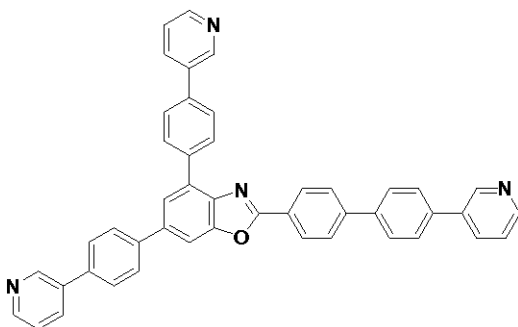


30

(1 - 1 3 1)

【 0 1 8 4 】

【 化 1 3 8 】



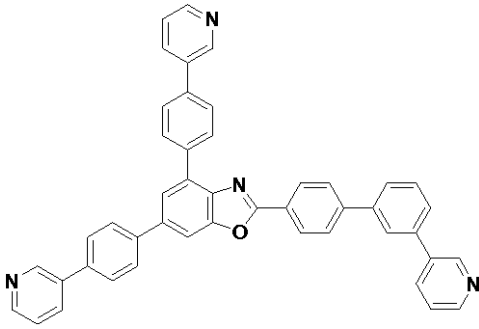
40

50

(1 - 1 3 2)

【 0 1 8 5 】

【 化 1 3 9 】



10

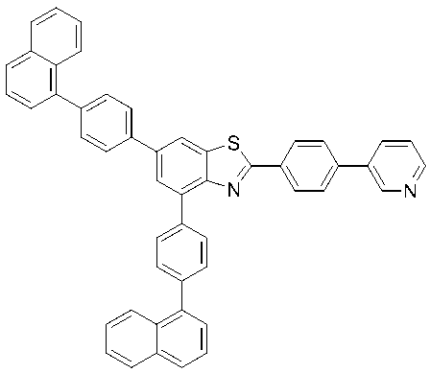
(1 - 1 3 3)

【 0 1 8 6 】

本発明の有機EL素子に好適に用いられる、前記一般式(1)で表されるベンゾチアゾール化合物の中で、好ましい化合物の具体例を以下に示すが、これらの化合物に限定されるものではない。

【 0 1 8 7 】

【 化 1 4 0 】



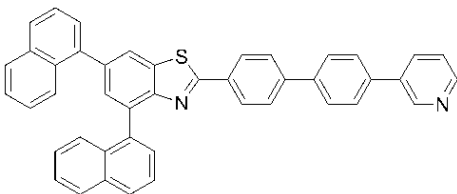
20

30

(2 - 1)

【 0 1 8 8 】

【 化 1 4 1 】



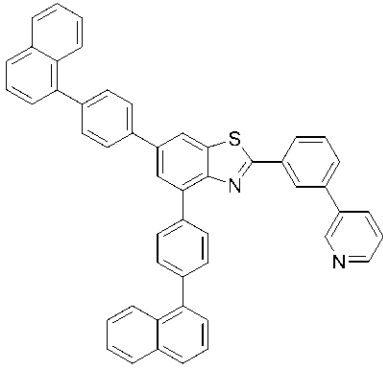
40

(2 - 2)

【 0 1 8 9 】

50

【化 1 4 2】

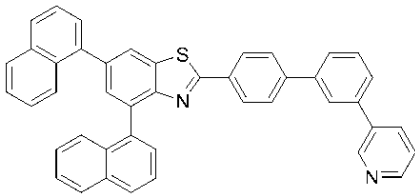


10

(2 - 3)

【 0 1 9 0】

【化 1 4 3】

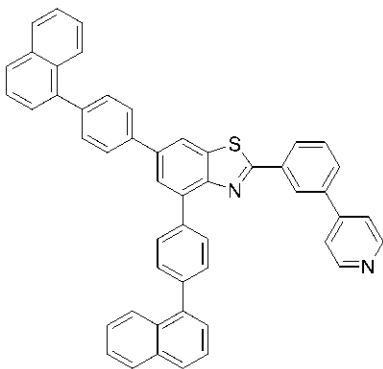


20

(2 - 4)

【 0 1 9 1】

【化 1 4 4】

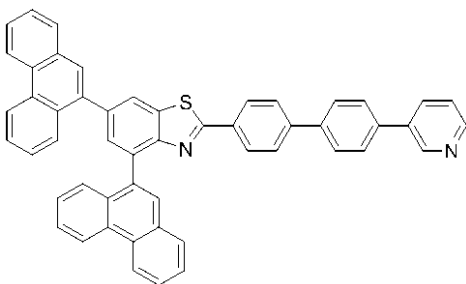


30

(2 - 5)

【 0 1 9 2】

【化 1 4 5】



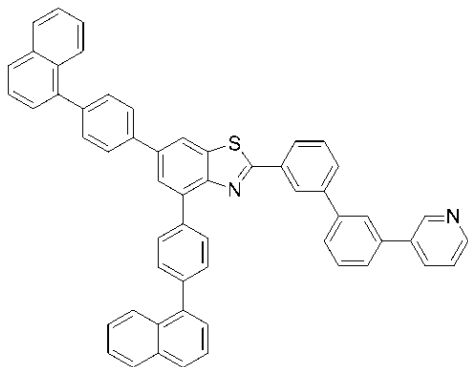
40

(2 - 6)

【 0 1 9 3】

50

【化 1 4 6】

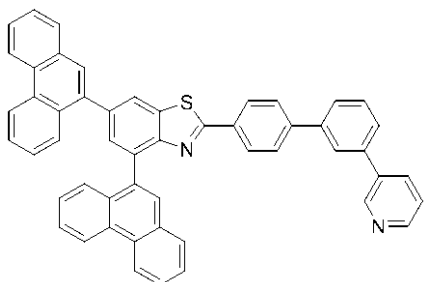


10

(2 - 7)

【 0 1 9 4】

【化 1 4 7】

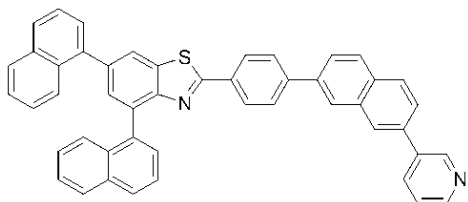


20

(2 - 8)

【 0 1 9 5】

【化 1 4 8】

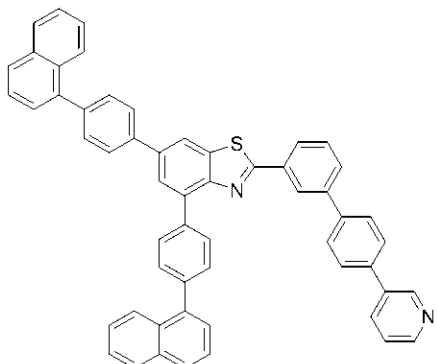


30

(2 - 9)

【 0 1 9 6】

【化 1 4 9】



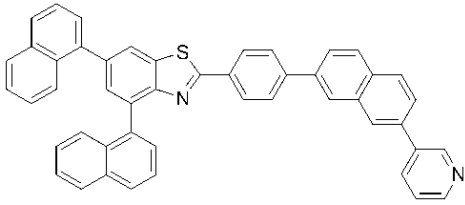
40

(2 - 1 0)

【 0 1 9 7】

50

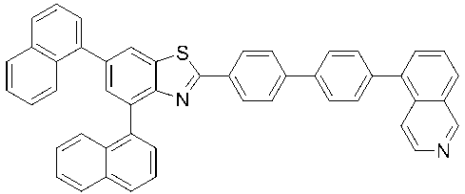
【化 1 5 0】



(2 - 1 1)

【 0 1 9 8】

【化 1 5 1】

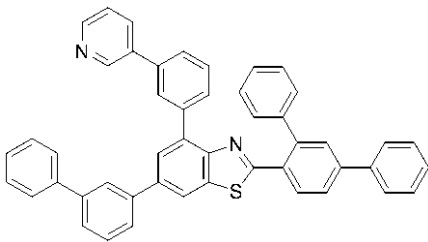


10

(2 - 1 2)

【 0 1 9 9】

【化 1 5 2】

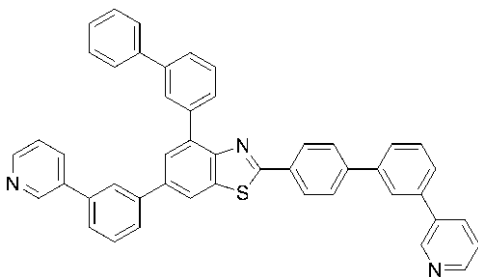


20

(2 - 1 3)

【 0 2 0 0】

【化 1 5 3】

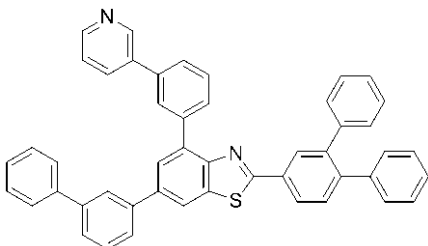


30

(2 - 1 4)

【 0 2 0 1】

【化 1 5 4】



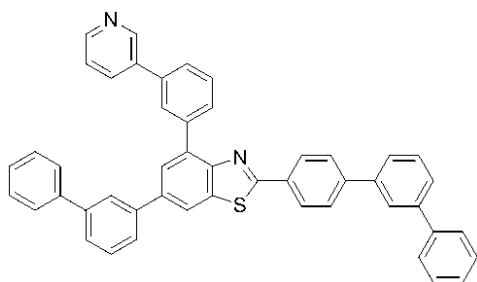
40

(2 - 1 5)

【 0 2 0 2】

50

【化 1 5 5】

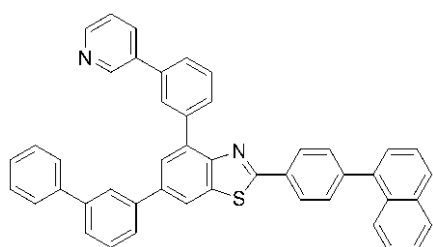


(2 - 1 6)

10

【 0 2 0 3】

【化 1 5 6】

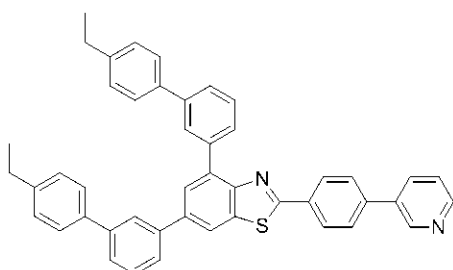


(2 - 1 7)

20

【 0 2 0 4】

【化 1 5 7】

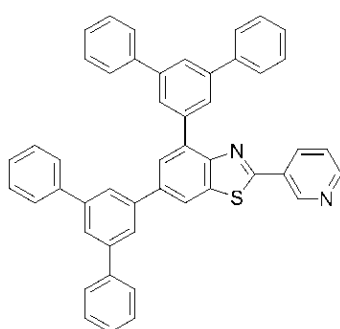


(2 - 1 8)

30

【 0 2 0 5】

【化 1 5 8】



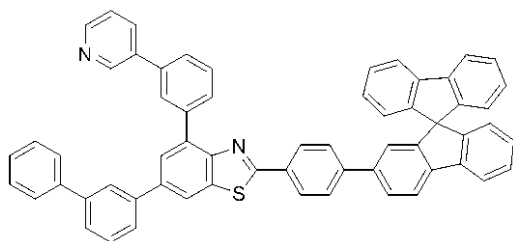
(2 - 1 9)

40

【 0 2 0 6】

50

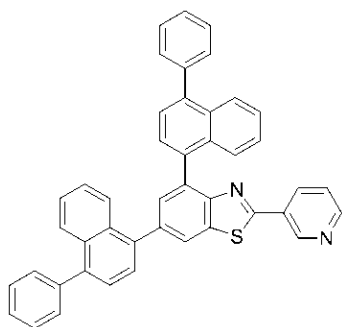
【化 1 5 9】



(2 - 2 0)

【 0 2 0 7】

【化 1 6 0】

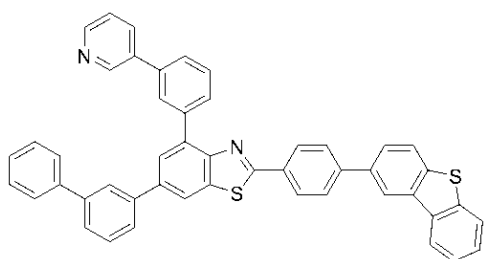


10

20

【 0 2 0 8】

【化 1 6 1】

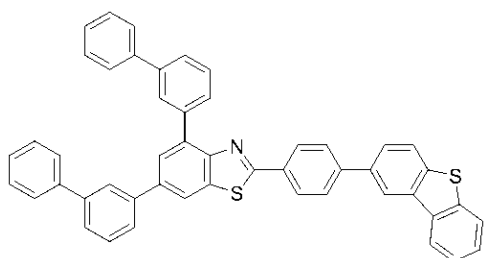


30

(2 - 2 2)

【 0 2 0 9】

【化 1 6 2】



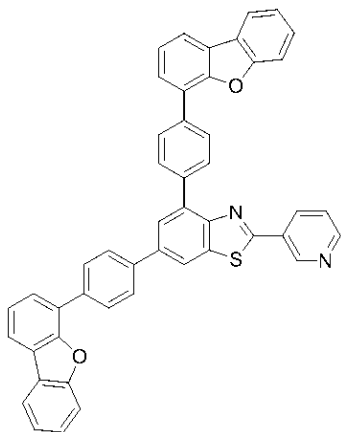
40

(2 - 2 3)

【 0 2 1 0】

50

【化 1 6 3】

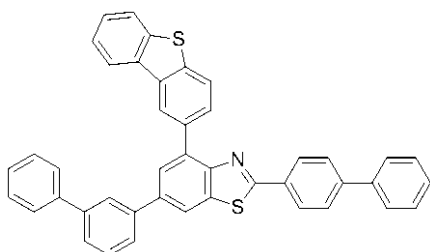


10

(2 - 2 4)

【 0 2 1 1】

【化 1 6 4】

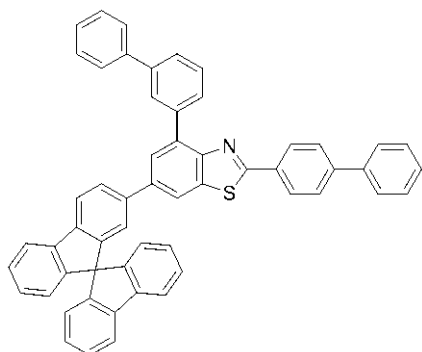


20

(2 - 2 5)

【 0 2 1 2】

【化 1 6 5】

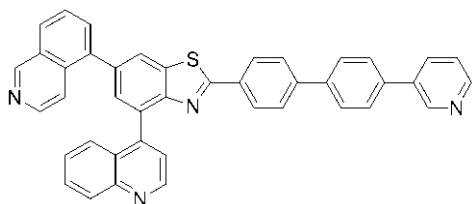


30

(2 - 2 6)

【 0 2 1 3】

【化 1 6 6】



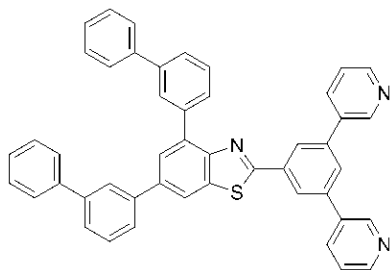
40

(2 - 2 7)

【 0 2 1 4】

50

【化 1 6 7】

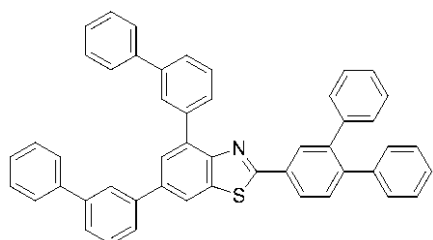


(2 - 2 8)

10

【 0 2 1 5】

【化 1 6 8】

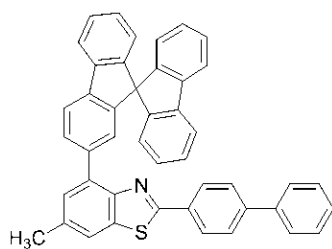


(2 - 2 9)

20

【 0 2 1 6】

【化 1 6 9】

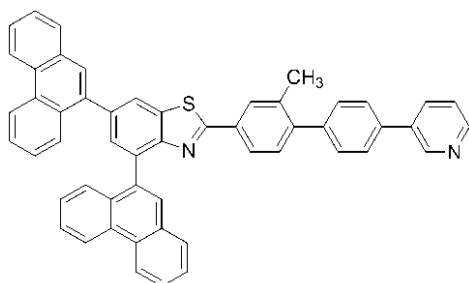


(2 - 3 0)

30

【 0 2 1 7】

【化 1 7 0】



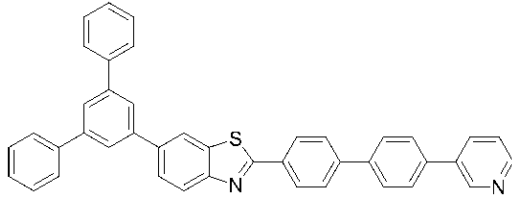
(2 - 3 1)

40

【 0 2 1 8】

50

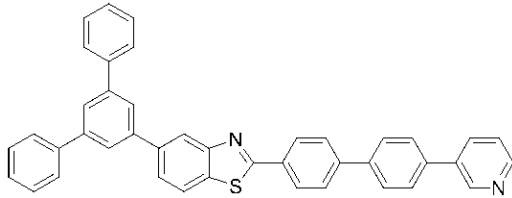
【化 1 7 1】



(2 - 3 2)

【 0 2 1 9】

【化 1 7 2】

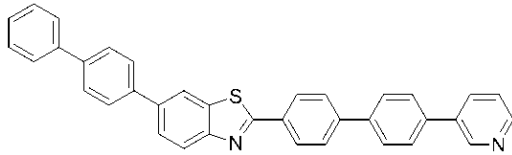


10

(2 - 3 3)

【 0 2 2 0】

【化 1 7 3】

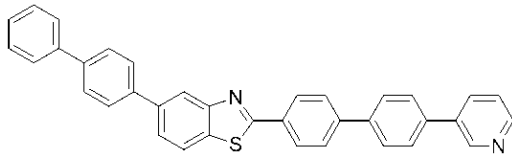


20

(2 - 3 4)

【 0 2 2 1】

【化 1 7 4】

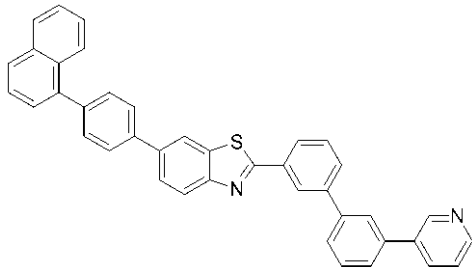


30

(2 - 3 5)

【 0 2 2 2】

【化 1 7 5】



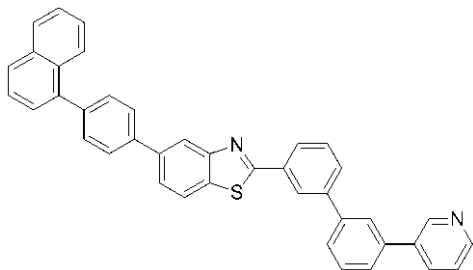
40

(2 - 3 6)

【 0 2 2 3】

50

【化 1 7 6】

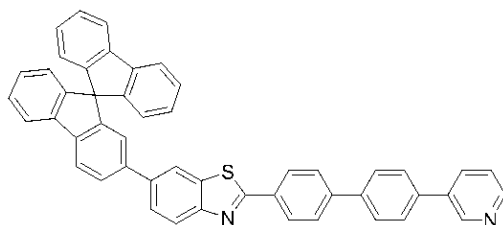


(2 - 3 7)

10

【 0 2 2 4】

【化 1 7 7】

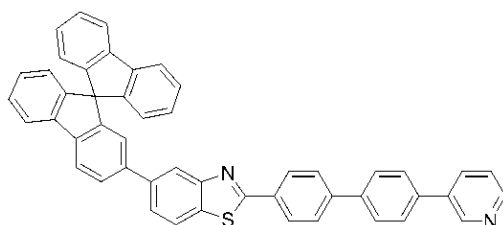


(2 - 3 8)

20

【 0 2 2 5】

【化 1 7 8】

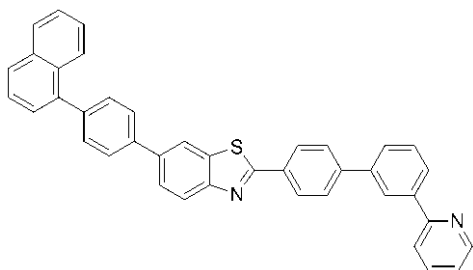


(2 - 3 9)

30

【 0 2 2 6】

【化 1 7 9】

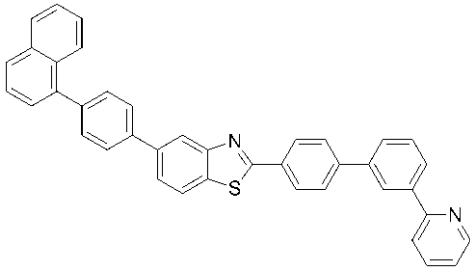


(2 - 4 0)

40

【 0 2 2 7】

【化 1 8 0】

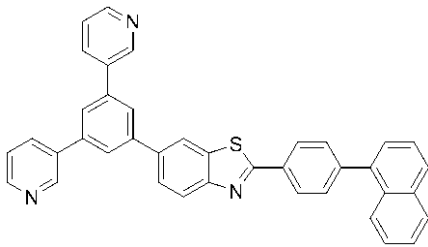


(2 - 4 1)

10

【 0 2 2 8】

【化 1 8 1】

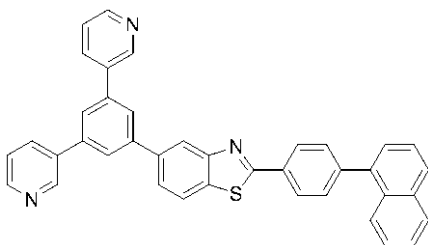


(2 - 4 2)

20

【 0 2 2 9】

【化 1 8 2】

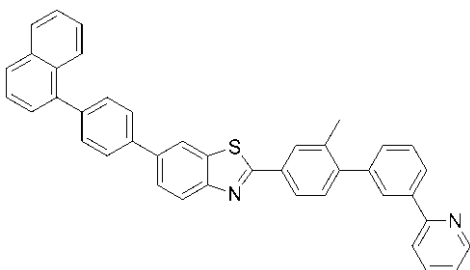


(2 - 4 3)

30

【 0 2 3 0】

【化 1 8 3】



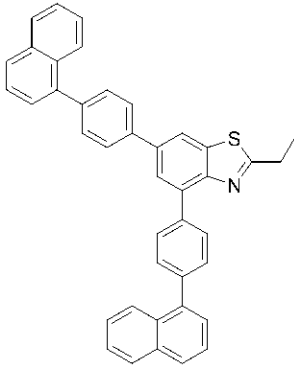
(2 - 4 4)

40

【 0 2 3 1】

50

【化 1 8 4】

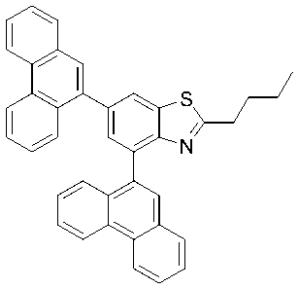


10

(2 - 4 5)

【 0 2 3 2】

【化 1 8 5】

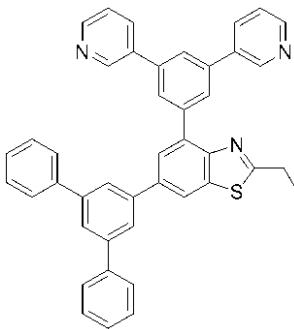


20

(2 - 4 6)

【 0 2 3 3】

【化 1 8 6】

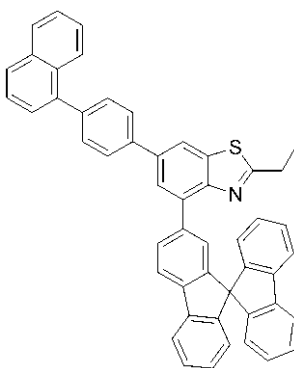


30

(2 - 4 7)

【 0 2 3 4】

【化 1 8 7】

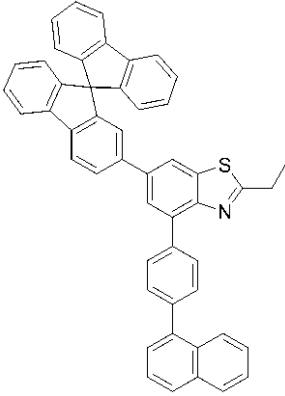


50

(2 - 4 8)

【 0 2 3 5 】

【 化 1 8 8 】

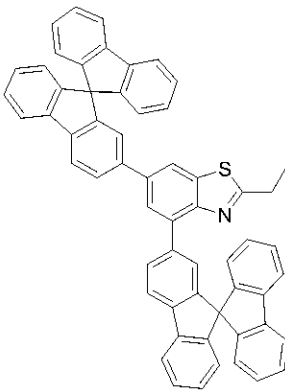


10

(2 - 4 9)

【 0 2 3 6 】

【 化 1 8 9 】

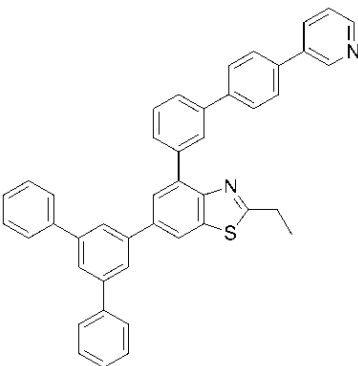


20

(2 - 5 0)

【 0 2 3 7 】

【 化 1 9 0 】



30

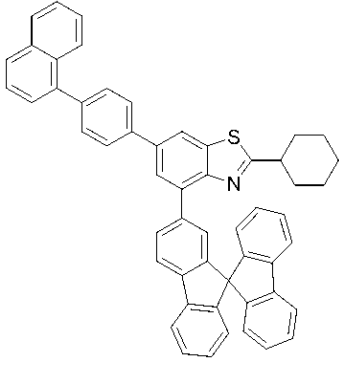
40

(2 - 5 1)

【 0 2 3 8 】

50

【化 1 9 1】

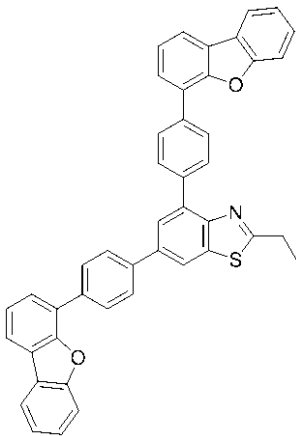


10

(2 - 5 2)

【 0 2 3 9】

【化 1 9 2】

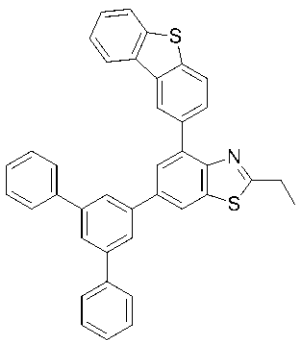


20

(2 - 5 3)

【 0 2 4 0】

【化 1 9 3】



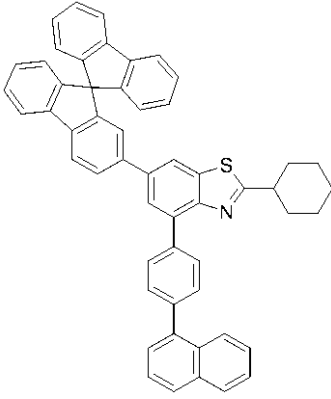
40

(2 - 5 4)

【 0 2 4 1】

50

【化 1 9 4】

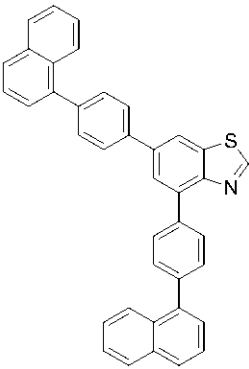


10

(2 - 5 5)

【 0 2 4 2】

【化 1 9 5】

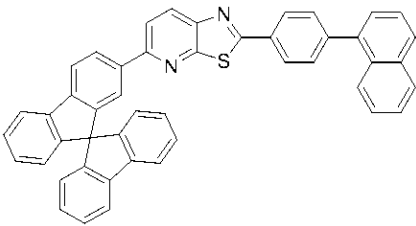


20

(2 - 5 6)

【 0 2 4 3】

【化 1 9 6】

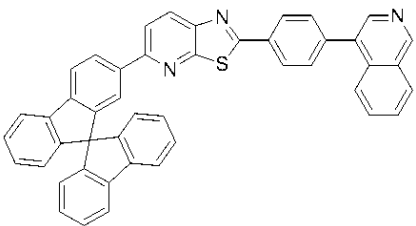


30

(2 - 5 7)

【 0 2 4 4】

【化 1 9 7】



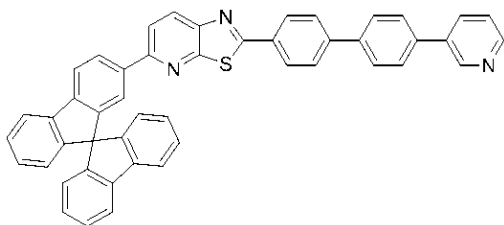
40

(2 - 5 8)

【 0 2 4 5】

50

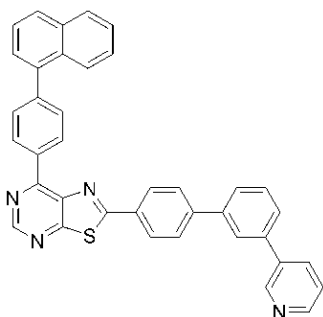
【化198】



(2 - 5 9)

【0246】

【化199】

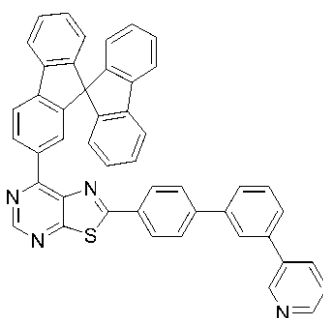


10

(2 - 6 0)

【0247】

【化200】



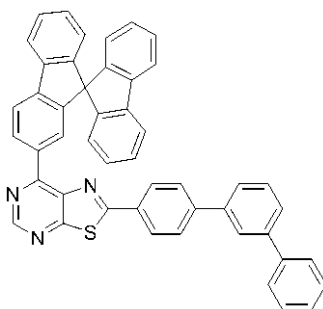
20

30

(2 - 6 1)

【0248】

【化201】



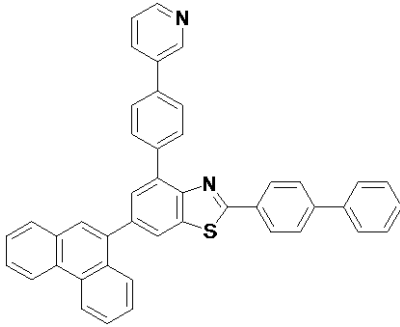
40

(2 - 6 2)

【0249】

50

【化 2 0 2】



10

(2 - 6 3)

【 0 2 5 0】

尚、上述したベンゾアゾール環構造を有する化合物は、それ自体公知の方法に準じて合成することができる（例えば、特許文献 5、6、非特許文献 6、7 参照）。

【 0 2 5 1】

一般式（1）で表されるベンゾアゾール環構造を有する化合物の精製はカラムクロマトグラフによる精製、シリカゲル、活性炭、活性白土などによる吸着精製、溶媒による再結晶や晶析法、昇華精製法などによって行った。化合物の同定は、NMR 分析によって行った。物性値として、融点、ガラス転移点（Tg）と仕事関数の測定を行った。融点は蒸着性の指標となるものであり、ガラス転移点（Tg）は薄膜状態の安定性の指標となり、仕事関数は正孔輸送性や正孔阻止性の指標となるものである。

20

その他、本発明の有機 EL 素子に用いられる化合物は、カラムクロマトグラフによる精製、シリカゲル、活性炭、活性白土などによる吸着精製、溶媒による再結晶や晶析法などによって精製を行った後、最後に昇華精製法によって精製したものをを用いた。

【 0 2 5 2】

融点とガラス転移点（Tg）は、粉体を用いて高感度示差走査熱量計（ブルカー・エイエックスエス製、DSC 3100SA）によって測定した。

【 0 2 5 3】

仕事関数は、ITO 基板の上に 100 nm の薄膜を作製して、イオン化ポテンシャル測定装置（住友重機械工業株式会社製、PYS-202）によって求めた。

30

【 0 2 5 4】

本発明の有機 EL 素子の構造としては、基板上に順次に、陽極、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層および陰極からなるもの、また、正孔輸送層と発光層の間に電子阻止層を有するもの、発光層と電子輸送層の間に正孔阻止層を有するもの、これらが多層構造においては有機層を何層か省略または兼ねることが可能であり、例えば正孔注入層と正孔輸送層を兼ねた構成とすること、電子注入層と電子輸送層を兼ねた構成とすること、などもできる。また、同一の機能を有する有機層を 2 層以上積層した構成とすることが可能であり、正孔輸送層を 2 層積層した構成、発光層を 2 層積層した構成、電子輸送層を 2 層積層した構成、などもできる。

40

【 0 2 5 5】

本発明の有機 EL 素子の陽極としては、ITO や金のような仕事関数の大きな電極材料が用いられる。本発明の有機 EL 素子の正孔注入層として、銅フタロシアニンに代表されるポルフィリン化合物の他、スターバースト型のトリフェニルアミン誘導体、分子中にトリフェニルアミン構造を 3 個以上、単結合またはヘテロ原子を含まない 2 価基で連結した構造を有するアリールアミン化合物などのトリフェニルアミン 3 量体および 4 量体、ヘキサシアノアザトリフェニレンのようなアクセプター性の複素環化合物や塗布型の高分子材料を用いることができる。これらの材料は蒸着法の他、スピンコート法やインクジェット法などの公知の方法によって薄膜形成を行うことができる。

【 0 2 5 6】

50

本発明の有機EL素子の正孔輸送層として、N, N' - ジフェニル - N, N' - ジ(m - トリル) - ベンジジン(以後、TPDと略称する)やN, N' - ジフェニル - N, N' - ジ(-ナフチル) - ベンジジン(以後、NPDと略称する)、N, N, N', N' - テトラピフェニルベンジジンなどのベンジジン誘導体、1, 1 - ビス[(ジ - 4 - トリルアミノ)フェニル]シクロヘキサン(TAPC)、種々のトリフェニルアミン3量体および4量体などを用いることができる。これらは、単独で成膜してもよいが、他の材料とともに混合して成膜した単層として使用してもよく、単独で成膜した層同士、混合して成膜した層同士、または単独で成膜した層と混合して成膜した層の積層構造としてもよい。また、正孔の注入・輸送層として、ポリ(3, 4 - エチレンジオキシチオフェン)(PEDOT) / ポリ(スチレンスルフォネート)(PSS)などの塗布型の高分子材料を用いることができる。これらの材料は蒸着法その他、スピコート法やインクジェット法などの公知の方法によって薄膜形成を行うことができる。

10

【0257】

また、正孔注入層または正孔輸送層において、該層に通常使用される材料に対し、さらにトリスプロモフェニルアミンヘキサクロルアンチモンをPドーピングしたものや、TPDなどのベンジジン誘導体の構造をその部分構造に有する高分子化合物などを用いることができる。

【0258】

本発明の有機EL素子の電子阻止層として、4, 4', 4'' - トリ(N - カルバゾリル)トリフェニルアミン(以後、CTTAと略称する)、9, 9 - ビス[4 - (カルバゾール - 9 - イル)フェニル]フルオレン、1, 3 - ビス(カルバゾール - 9 - イル)ベンゼン(以後、mCPと略称する)、2, 2 - ビス(4 - カルバゾール - 9 - イルフェニル)アダマンタン(Ad-Cz)などのカルバゾール誘導体、9 - [4 - (カルバゾール - 9 - イル)フェニル] - 9 - [4 - (トリフェニルシリル)フェニル] - 9H - フルオレンに代表されるトリフェニルシリル基とトリアリールアミン構造を有する化合物などの電子阻止作用を有する化合物を用いることができる。これらは、単独で成膜してもよいが、他の材料とともに混合して成膜した単層として使用してもよく、単独で成膜した層同士、混合して成膜した層同士、または単独で成膜した層と混合して成膜した層の積層構造としてもよい。これらの材料は蒸着法その他、スピコート法やインクジェット法などの公知の方法によって薄膜形成を行うことができる。

20

30

【0259】

本発明の有機EL素子の発光層として、本発明のベンゾアゾール環構造を有する化合物の他、Alq₃をはじめとするキノリノール誘導体の金属錯体の他、各種の金属錯体、アントラセン誘導体、ビススチリルベンゼン誘導体、ピレン誘導体、オキサゾール誘導体、ポリパラフェニレンピニレン誘導体などを用いることができる。また、発光層をホスト材料とドーパント材料とで構成してもよく、ホスト材料として、本発明のベンゾアゾール環構造とピリドインドール環構造を有する化合物の他、前記発光材料に加え、チアゾール誘導体、ペンズイミダゾール誘導体、ポリジアルキルフルオレン誘導体などを用いることができる。またドーパント材料としては、キナクリドン、クマリン、ルブレン、ペリレンおよびそれらの誘導体、ベンゾピラン誘導体、ローダミン誘導体、アミノスチリル誘導体などを用いることができる。これらは、単独で成膜してもよいが、他の材料とともに混合して成膜した単層として使用してもよく、単独で成膜した層同士、混合して成膜した層同士、または単独で成膜した層と混合して成膜した層の積層構造としてもよい。

40

【0260】

また、発光材料として燐光発光体を使用することも可能である。燐光発光体としては、イリジウムや白金などの金属錯体の燐光発光体を使用することができる。Ir(ppy)₃などの緑色の燐光発光体、FIrpic、FIr6などの青色の燐光発光体、Btp₂ Ir(acac)などの赤色の燐光発光体などが用いられ、このときのホスト材料としては正孔注入・輸送性のホスト材料として4, 4' - ジ(N - カルバゾリル)ピフェニル(CBP)やCTTA、mCPなどのカルバゾール誘導体などに加え、本発明のベンゾアゾー

50

ル環構造とピリドインドール環構造を有する化合物を用いることができる。電子輸送性のホスト材料として、p-ビス(トリフェニルシリル)ベンゼン(UGH2)や2,2',2''-(1,3,5-フェニレン)-トリス(1-フェニル-1H-ベンズイミダゾール)(TPBI)などを用いることができ、高性能の有機EL素子を作製することができる。

【0261】

燐光性の発光材料のホスト材料へのドーブは濃度消光を避けるため、発光層全体に対して1~30重量パーセントの範囲で、共蒸着によってドーブすることが好ましい。

【0262】

また、発光材料としてPIC-TRZ、CC2TA、PXZ-TRZ、4CzIPNなどのCDCB誘導体などの遅延蛍光を放射する材料を使用することも可能である(例えば、非特許文献3参照)。

10

【0263】

これらの材料は蒸着法その他、スピコート法やインクジェット法などの公知の方法によって薄膜形成を行うことができる。

【0264】

本発明の有機EL素子の正孔阻止層として、本発明のベンゾアゾール環構造を有する化合物の他、バソクプロイン(BCPと略称する)などのフェナントロリン誘導体や、BA1qなどのキノリノール誘導体の金属錯体の他、各種の希土類錯体、オキサゾール誘導体、トリアゾール誘導体、トリアジン誘導体など、正孔阻止作用を有する化合物を用いることができる。これらの材料は電子輸送層の材料を兼ねてもよい。これらは、単独で成膜してもよいが、他の材料とともに混合して成膜した単層として使用してもよく、単独で成膜した層同士、混合して成膜した層同士、または単独で成膜した層と混合して成膜した層の積層構造としてもよい。これらの材料は蒸着法その他、スピコート法やインクジェット法などの公知の方法によって薄膜形成を行うことができる。

20

【0265】

本発明の有機EL素子の電子輸送層として、本発明のベンゾアゾール環構造を有する化合物の他、Alq₃、BA1qをはじめとするキノリノール誘導体の金属錯体の他、各種金属錯体、トリアゾール誘導体、トリアジン誘導体、オキサジアゾール誘導体、ピリジン誘導体、ベンズイミダゾール誘導体、チアジアゾール誘導体、アントラセン誘導体、カルボジイミド誘導体、キノキサリン誘導体、ピリドインドール誘導体、フェナントロリン誘導体、シロール誘導体などを用いることができる。これらは、単独で成膜してもよいが、他の材料とともに混合して成膜した単層として使用してもよく、単独で成膜した層同士、混合して成膜した層同士、または単独で成膜した層と混合して成膜した層の積層構造としてもよい。これらの材料は蒸着法その他、スピコート法やインクジェット法などの公知の方法によって薄膜形成を行うことができる。

30

【0266】

本発明の有機EL素子の電子注入層として、本発明のベンゾアゾール環構造を有する化合物の他、フッ化リチウム、フッ化セシウムなどのアルカリ金属塩、フッ化マグネシウムなどのアルカリ土類金属塩、リチウムキノリノールなどのキノリノール誘導体の金属錯体、酸化アルミニウムなどの金属酸化物などを用いることができるが、電子輸送層と陰極の好ましい選択においては、これを省略することができる。

40

【0267】

さらに、電子注入層または電子輸送層において、該層に通常使用される材料に対し、さらにセシウムなどの金属をNドーピングしたものをを用いることができる。

【0268】

本発明の有機EL素子の陰極として、アルミニウムのような仕事関数の低い電極材料や、マグネシウム銀合金、マグネシウムインジウム合金、アルミニウムマグネシウム合金のような、より仕事関数の低い合金が電極材料として用いられる。

【0269】

以下、本発明の実施の形態について、実施例により具体的に説明するが、本発明はその

50

要旨を越えない限り、以下の実施例に限定されるものではない。

【実施例 1】

【0270】

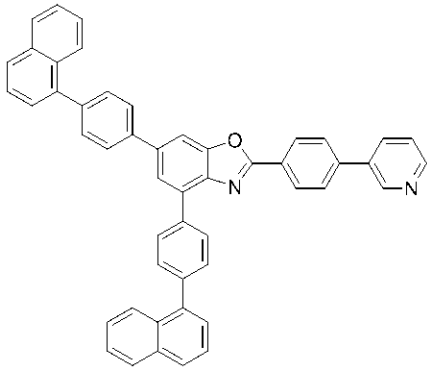
< 4, 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - 2 - (4 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 1) の合成 >

反応容器に、2 - (4 - クロロフェニル) - 4, 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾール 4.5 g、3 - ピリジルボロン酸 1.0 g、ビス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) 0.32 g、トリシクロヘキシルホスフィン 0.4 g、リン酸三カリウム 4.7 g を加え、一晚還流撹拌した。放冷した後、分液、水層から酢酸エチルを加え抽出を行った後、濃縮し、得られた粗生成物をカラムクロマトグラフ (担体 : シリカゲル、溶離液 : ジクロロメタン / 酢酸エチル) によって精製した後、ジクロロメタン / メタノールによる晶析を行うことで、4, 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - 2 - (4 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 1) の白色粉体 1.8 g (収率 38%) を得た。

10

【0271】

【化203】



20

(1 - 1)

【0272】

得られた白色粉体について NMR を使用して構造を同定した。

30

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) で以下の 32 個の水素のシグナルを検出した。

(ppm) = 8.98 (1H)、8.68 (1H)、8.52 (2H)、8.34 (2H)、8.12 (1H)、8.07 - 7.89 (10H)、7.82 (2H)、7.76 (2H)、7.69 (2H)、7.64 (9H)。

【実施例 2】

【0273】

< 2 - { 4' - (ピリジン - 3 - イル) - ビフェニル - 4 - イル } - 4, 6 - ジ (ナフタレン - 1 - イル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 2) の合成 >

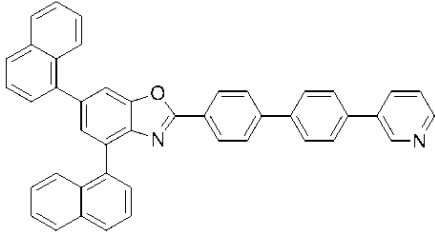
実施例 1 において、2 - (4 - クロロフェニル) - 4, 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールに代えて、2 - (4 - クロロフェニル) - 4, 6 - ジ (ナフタレン - 1 - イル) - ベンゾオキサゾールを用い、3 - ピリジルボロン酸に代えて、4 - (ピリジン - 3 - イル) フェニルボロン酸を用い、同様の条件で反応を行うことによって、2 - { 4' - (ピリジン - 3 - イル) - ビフェニル - 4 - イル } - 4, 6 - ジ (ナフタレン - 1 - イル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 2) の白色粉体 2.1 g (収率 34%) を得た。

40

【0274】

50

【化 2 0 4】



(1 - 2)

【 0 2 7 5】

10

得られた白色粉体についてNMRを使用して構造を同定した。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) で以下の 28 個の水素のシグナルを検出した。

(ppm) = 8 . 9 4 (1 H)、8 . 6 4 (1 H)、8 . 3 5 (2 H)、8 . 1 3 (1 H)、8 . 0 5 - 7 . 9 1 (6 H)、7 . 8 5 (1 H)、7 . 8 2 - 7 . 7 6 (5 H)、7 . 7 2 (2 H)、7 . 6 8 (2 H)、7 . 6 4 - 7 . 3 8 (7 H)。

【実施例 3】

【 0 2 7 6】

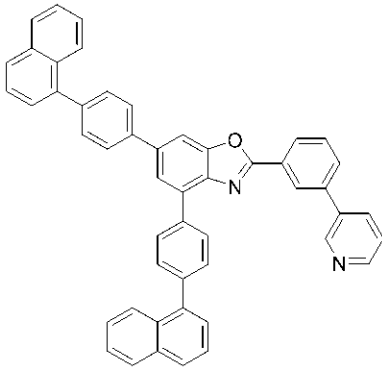
< 4 , 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - 2 - (3 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 3) の合成 >

実施例 1 において、2 - (4 - クロロフェニル) - 4 , 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールに代えて、2 - (3 - クロロフェニル) - 4 , 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールを用い、ビス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) に代えて、トリス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) を用い、同様の条件で反応を行うことによって、4 , 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - 2 - (3 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 3) の白色粉体 3 . 6 g (収率 4 8 %) を得た。

20

【 0 2 7 7】

【化 2 0 5】



30

(1 - 3)

【 0 2 7 8】

得られた白色粉体についてNMRを使用して構造を同定した。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) で以下の 32 個の水素のシグナルを検出した。

(ppm) = 9 . 0 1 (1 H)、8 . 6 9 (1 H)、8 . 6 0 (1 H)、8 . 4 3 (1 H)、8 . 3 2 (2 H)、8 . 1 1 (1 H)、8 . 0 7 - 8 . 0 1 (3 H)、7 . 9 8 - 7 . 8 8 (7 H)、7 . 8 3 - 7 . 6 7 (6 H)、7 . 6 2 - 7 . 4 2 (9 H)。

【実施例 4】

【 0 2 7 9】

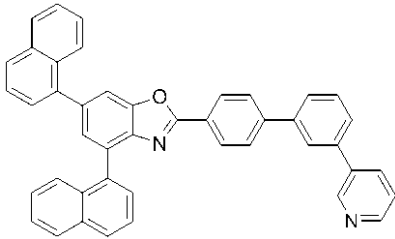
< 2 - { 3 ' - (ピリジン - 3 - イル) - ビフェニル - 4 - イル } - 4 , 6 - ジ (ナフタレン - 1 - イル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 4) の合成 >

50

実施例 1 において、2 - (4 - クロロフェニル) - 4 , 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールに代えて、2 - (4 - クロロフェニル) - 4 , 6 - ジ (ナフタレン - 1 - イル) - ベンゾオキサゾールを用い、3 - ピリジルボロン酸に代えて、3 - (ピリジン - 3 - イル) フェニルボロン酸を用い、ビス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) に代えて、トリス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) を用い、同様の条件で反応を行うことによって、2 - {3' - (ピリジン - 3 - イル) - ピフェニル - 4 - イル} - 4 , 6 - ジ (ナフタレン - 1 - イル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 4) の白色粉体 4 . 4 g (収率 71%) を得た。

【0280】

【化206】



(1 - 4)

【0281】

得られた白色粉体についてNMRを使用して構造を同定した。

¹H - NMR (CDCl₃) で以下の 28 個の水素のシグナルを検出した。

(ppm) = 8 . 94 (1H)、8 . 65 (1H)、8 . 36 (2H)、8 . 21 (1H)、8 . 05 - 7 . 92 (6H)、7 . 85 (2H)、7 . 83 - 7 . 76 (3H)、7 . 75 - 7 . 74 (12H)。

【実施例 5】

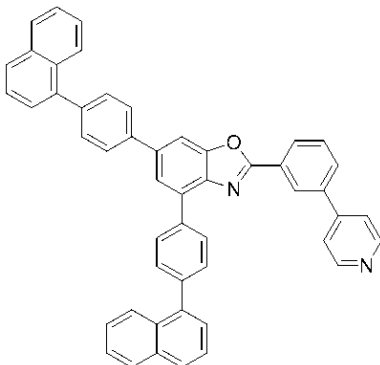
【0282】

< 2 - (3 - ピリジン - 4 - イル - フェニル) - 4 , 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 5) の合成 >

実施例 1 において、2 - (4 - クロロフェニル) - 4 , 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールに代えて、2 - (3 - クロロフェニル) - 4 , 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールを用い、3 - ピリジルボロン酸に代えて、4 - ピリジルボロン酸を用い、ビス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) に代えて、トリス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) を用い、同様の条件で反応を行うことによって、2 - (3 - ピリジン - 4 - イル - フェニル) - 4 , 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 5) の白色粉体 3 . 0 g (収率 40%) を得た。

【0283】

【化207】



(1 - 5)

【0284】

得られた白色粉体についてNMRを使用して構造を同定した。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) で以下の32個の水素のシグナルを検出した。

(ppm) = 8.76 (2H)、8.66 (1H)、8.47 (1H)、8.32 (2H)、8.11 (1H)、8.07 - 8.02 (2H)、7.99 - 7.89 (7H)、7.85 (1H)、7.78 - 7.48 (15H)。

【実施例6】

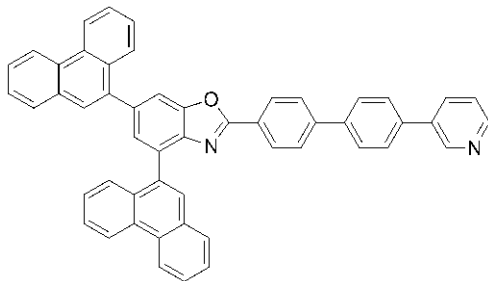
【0285】

< 2 - { 4' - (ピリジン - 3 - イル) - ビフェニル - 4 - イル } - 4, 6 - ジ (フェナントレン - 9 - イル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 6) の合成 >

実施例 1 において、2 - (4 - クロロフェニル) - 4, 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールに代えて、2 - (4 - クロロフェニル) - 4, 6 - ジ (フェナントレン - 9 - イル) - ベンゾオキサゾールを用い、3 - ピリジルボロン酸に代えて、4 - (ピリジン - 3 - イル) フェニルボロン酸を用い、ビス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) に代えて、トリス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) を用い、同様の条件で反応を行うことによって、2 - { 4' - (ピリジン - 3 - イル) - ビフェニル - 4 - イル } - 4, 6 - ジ (フェナントレン - 9 - イル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 6) の白色粉体 2.1 g (収率 17%) を得た。

【0286】

【化208】



(1-6)

【0287】

得られた白色粉体についてNMRを使用して構造を同定した。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) で以下の32個の水素のシグナルを検出した。

(ppm) = 8.93 (1H)、8.87 - 8.63 (4H)、8.62 (1H)、8.33 (2H)、8.18 (1H)、8.08 - 7.88 (7H)、7.80 - 7.55 (15H)、7.40 (1H)。

【実施例7】

【0288】

< 2 - { 3' - (ピリジン - 3 - イル) - ビフェニル - 3 - イル } - 4, 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 7) の合成 >

実施例 1 において、2 - (4 - クロロフェニル) - 4, 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールに代えて、2 - (3 - クロロフェニル) - 4, 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールを用い、3 - ピリジルボロン酸に代えて、3 - (ピリジン - 3 - イル) フェニルボロン酸を用い、ビス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) に代えて、トリス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) を用い、同様の条件で反応を行うことによって、2 - { 3' - (ピリジン - 3 - イル) - ビフェニル - 3 - イル } - 4, 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 7) 白色粉体 2.0 g (収率 27%) を得た。

【0289】

10

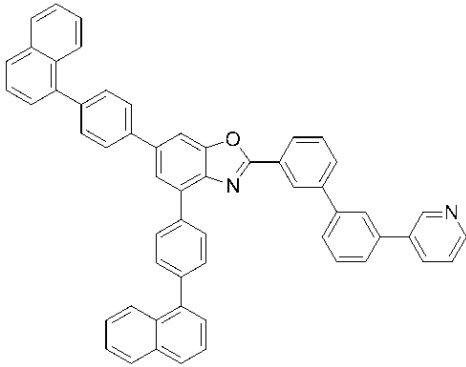
20

30

40

50

【化 2 0 9】



10

(1 - 7)

【 0 2 9 0】

得られた白色粉末についてNMRを使用して構造を同定した。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) で以下の 36 個の水素のシグナルを検出した。

(ppm) = 8 . 9 8 (1 H)、8 . 6 8 - 8 . 6 1 (2 H)、8 . 4 2 (1 H)、
8 . 3 2 (2 H)、8 . 1 5 - 7 . 4 0 (3 0 H)。

【実施例 8】

【 0 2 9 1】

< 2 - { 3 ' - (ピリジン - 3 - イル) - ビフェニル - 4 - イル } - 4 , 6 - ジ (フェナントレン - 9 - イル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 8) の合成 >

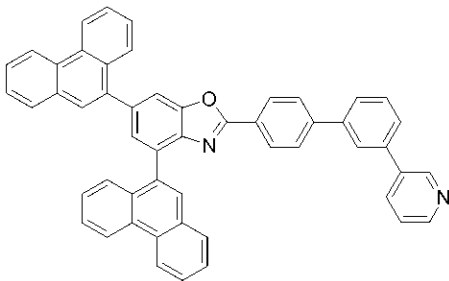
実施例 1 において、2 - (4 - クロロフェニル) - 4 , 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールに代えて、2 - (4 - クロロフェニル) - 4 , 6 - ジ (フェナントレン - 9 - イル) - ベンゾオキサゾールを用い、3 - ピリジルボロン酸に代えて、3 - (ピリジン - 3 - イル)フェニルボロン酸を用い、ビス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) に代えて、トリス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) を用い、同様の条件で反応を行うことによって、2 - { 3 ' - (ピリジン - 3 - イル) - ビフェニル - 4 - イル } - 4 , 6 - ジ (フェナントレン - 9 - イル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 8) の白色粉末 4 . 0 g (収率 3 3 %) を得た。

20

30

【 0 2 9 2】

【化 2 1 0】



40

(1 - 8)

【 0 2 9 3】

得られた白色粉末についてNMRを使用して構造を同定した。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) で以下の 32 個の水素のシグナルを検出した。

(ppm) = 8 . 9 3 (1 H)、8 . 8 7 - 8 . 7 3 (4 H)、8 . 6 5 (1 H)、
8 . 3 6 (2 H)、8 . 1 8 (1 H)、8 . 0 8 - 7 . 8 3 (8 H)、7 . 7 9 - 7 . 5 4 (1 4 H)、7 . 4 2 (1 H)。

【実施例 9】

【 0 2 9 4】

50

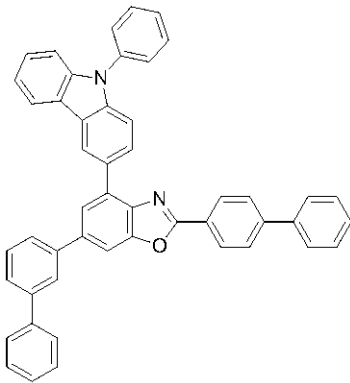
< 6 - (ビフェニル - 3 - イル) - 2 - (ビフェニル - 4 - イル) - 4 - (9 - フェニル - [9H] - カルバゾール - 3 - イル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 73) の合成 >

実施例 1 において、2 - (4 - クロロフェニル) - 4, 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールに代えて、6 - (ビフェニル - 3 - イル) - 2 - (4 - クロロフェニル) - 4 - (9 - フェニル - [9H] - カルバゾール - 3 - イル) - ベンゾオキサゾールを用い、3 - ピリジルボロン酸に代えて、フェニルボロン酸を用い、同様の条件で反応を行うことによって、6 - (ビフェニル - 3 - イル) - 2 - (ビフェニル - 4 - イル) - 4 - (9 - フェニル - [9H] - カルバゾール - 3 - イル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 73) の白色粉体 3.0 g (収率 44%) を得た。

10

【0295】

【化211】



20

(1-73)

【0296】

得られた白色粉体について NMR を使用して構造を同定した。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) で以下の 32 個の水素のシグナルを検出した。

(ppm) = 8.90 (1H)、8.45 (2H)、8.30 (1H)、8.26 (1H)、7.94 (1H)、7.91 (1H)、7.85 (2H)、7.80 (3H)、7.74 - 7.32 (20H)。

30

【実施例 10】

【0297】

< 2 - (3' - (ピリジン - 3 - イル) - ビフェニル - 4 - イル) - 6 - (9, 9' - スピロピ[9H]フルオレン - 2 - イル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 91) の合成 >

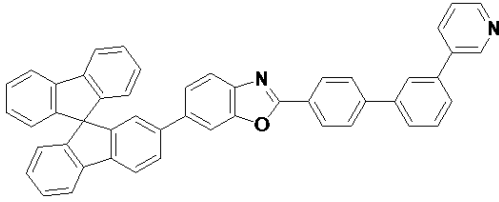
実施例 1 において、2 - (4 - クロロフェニル) - 4, 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールに代えて、2 - (4 - クロロフェニル) - 6 - (9, 9' - スピロピ[9H]フルオレン - 2 - イル) - ベンゾオキサゾールを用い、3 - ピリジルボロン酸に代えて、3 - (ピリジン - 3 - イル) フェニルボロン酸を用い、ビス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) に代えて、トリス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) を用い、同様の条件で反応を行うことによって、2 - (3' - (ピリジン - 3 - イル) - ビフェニル - 4 - イル) - 6 - (9, 9' - スピロピ[9H]フルオレン - 2 - イル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 91) の白色粉体 10.5 g (収率 58%) を得た。

40

【0298】

50

【化 2 1 2】



(1 - 9 1)

【 0 2 9 9 】

得られた白色粉体についてNMRを使用して構造を同定した。

10

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) で以下の 30 個の水素のシグナルを検出した。

(ppm) = 8 . 9 4 (1 H)、8 . 6 6 (1 H)、8 . 3 3 (2 H)、8 . 0 1 - 7 . 7 7 (8 H)、7 . 7 7 - 7 . 5 7 (6 H)、7 . 5 2 - 7 . 3 7 (5 H)、7 . 1 5 (3 H)、7 . 0 3 (1 H)、6 . 8 2 (2 H)、6 . 7 8 (1 H)。

【実施例 1 1】

【 0 3 0 0 】

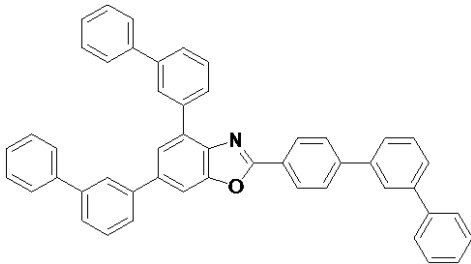
< 4 , 6 - ビス (ピフェニル - 3 - イル) - 2 - ([1 , 1 ' ; 3 ' , 1 ' '] ターフェニル - 4 - イル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 9 6) の合成 >

実施例 1 において、2 - (4 - クロロフェニル) - 4 , 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールに代えて、4 , 6 - ビス (ピフェニル - 3 - イル) - 2 - (4 - クロロフェニル) - ベンゾオキサゾールを用い、3 - ピリジルボロン酸に代えて、3 - ピフェニルボロン酸を用い、同様の条件で反応を行うことによって、4 , 6 - ビス (ピフェニル - 3 - イル) - 2 - ([1 , 1 ' ; 3 ' , 1 ' '] ターフェニル - 4 - イル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 9 6) の白色粉体 8 . 3 g (収率 6 8 . 0 %) を得た。

20

【 0 3 0 1 】

【化 2 1 3】



30

(1 - 9 6)

【 0 3 0 2 】

得られた白色粉体についてNMRを使用して構造を同定した。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) で以下の 33 個の水素のシグナルを検出した。

40

(ppm) = 8 . 4 4 (2 H)、8 . 3 5 (1 H)、8 . 1 4 (1 H)、8 . 0 0 - 7 . 8 2 (6 H)、7 . 8 0 - 7 . 4 7 (2 0 H)、7 . 4 6 - 7 . 3 7 (3 H)。

【実施例 1 2】

【 0 3 0 3 】

< 4 , 6 - ジ (ジベンゾフラン - 4 - イル) - 2 - (4 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 1 0 0) の合成 >

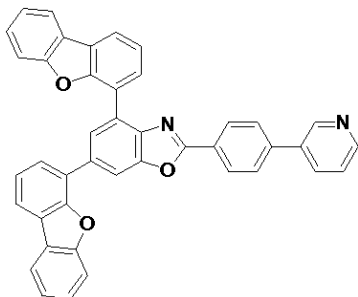
実施例 1 において、2 - (4 - クロロフェニル) - 4 , 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールに代えて、2 - (4 - クロロフェニル) - 4 , 6 - ジ (ジベンゾフラン - 4 - イル) - ベンゾオキサゾールを用い、ビス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) に代えて、トリス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) を用い、同様の条件で反応を行うことによって、4 , 6 - ジ (ジベンゾフラン - 4

50

-イル) - 2 - (4-ピリジン-3-イル-フェニル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 100) の黄色粉体 7.3 g (収率 61%) を得た。

【0304】

【化214】



10

(1-100)

【0305】

得られた黄色粉体についてNMRを使用して構造を同定した。

¹H-NMR (CDCl₃) で以下の24個の水素のシグナルを検出した。

(ppm) = 8.96 (1H)、8.67 (1H)、8.59 (1H)、8.47 (2H)、8.37 (1H)、8.32 (1H)、8.06 (4H)、7.99 (1H)、7.84 (1H)、7.78 (2H)、7.69 (1H)、7.62 (1H)、7.61 (1H)、7.58 - 7.36 (6H)。

20

【実施例13】

【0306】

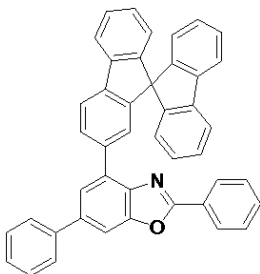
< 2,6-ジフェニル-4-(9,9'-スピロピ[9H]フルオレン-2-イル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1-106) の合成 >

実施例1において、2-(4-クロロフェニル)-4,6-ビス(4-ナフタレン-1-イル-フェニル) - ベンゾオキサゾールに代えて、6-クロロ-2-フェニル-4-(9,9'-スピロピ[9H]フルオレン-2-イル) - ベンゾオキサゾールを用い、3-ピリジルボロン酸に代えて、フェニルボロン酸を用い、同様の条件で反応を行うことによって、2,6-ジフェニル-4-(9,9'-スピロピ[9H]フルオレン-2-イル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1-106) の白色粉体 4.5 g (収率 41%) を得た。

30

【0307】

【化215】



40

(1-106)

【0308】

得られた白色粉体についてNMRを使用して構造を同定した。

¹H-NMR (CDCl₃) で以下の27個の水素のシグナルを検出した。

(ppm) = 8.15 - 7.98 (6H)、7.97 - 7.85 (4H)、7.60 - 7.36 (9H)、7.17 (4H)、6.90 - 6.80 (4H)。

【実施例14】

【0309】

< 2-{3,5-ジ([9H]-カルバゾール-9-イル) - フェニル} - 4,6-ジフ

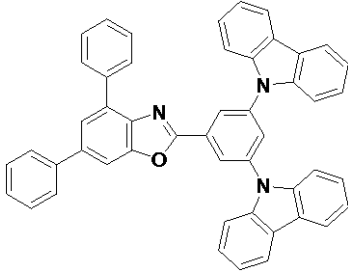
50

エニル - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 107) の合成 >

実施例 1 において、2 - (4 - クロロフェニル) - 4, 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾール に代えて、2 - (3, 5 - ジクロロフェニル) - 4, 6 - ジフェニル - ベンゾオキサゾール を用い、3 - ピリジルボロン酸 に代えて、カルバゾール を用い、同様の条件で反応を行うことによって、2 - {3, 5 - ジ ([9H] - カルバゾール - 9 - イル) - フェニル} - 4, 6 - ジフェニル - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 107) の白色粉末 4.8 g (収率 30%) を得た。

【0310】

【化216】



10

(1 - 107)

【0311】

得られた白色粉末について NMR を使用して構造を同定した。

¹H - NMR (CDCl₃) で以下の 31 個の水素のシグナルを検出した。

(ppm) = 8.67 (2H)、8.21 (4H)、8.10 (2H)、8.01 (1H)、7.85 (1H)、7.79 (1H)、7.73 (2H)、7.63 (4H)、7.57 - 7.46 (8H)、7.46 - 7.33 (6H)。

【実施例 15】

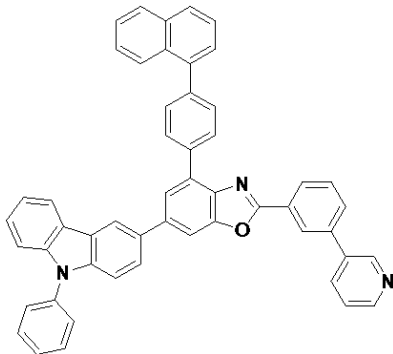
【0312】

< 4 - (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - 6 - (9 - フェニル - [9H] - カルバゾール - 3 - イル) - 2 - (3 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 108) の合成 >

実施例 1 において、2 - (4 - クロロフェニル) - 4, 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾール に代えて、2 - (3 - クロロフェニル) - 4 - (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - 6 - (9 - フェニル - [9H] - カルバゾール - 3 - イル) - ベンゾオキサゾール を用い、同様の条件で反応を行うことによって、4 - (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - 6 - (9 - フェニル - [9H] - カルバゾール - 3 - イル) - 2 - (3 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 108) の白色粉末 2.6 g (収率 47%) を得た。

【0313】

【化217】



40

(1 - 108)

【0314】

50

得られた白色粉体についてNMRを使用して構造を同定した。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) で以下の33個の水素のシグナルを検出した。

(ppm) = 9.01 (1H)、8.69 (1H)、8.61 (1H)、8.53 (1H)、8.44 (1H)、8.35 (2H)、8.28 (1H)、8.14 (1H)、8.06 (1H)、8.05 (1H)、7.97 (1H)、7.96 (1H)、7.93 (1H)、7.86 - 7.42 (18H)、7.37 (1H)。

【実施例16】

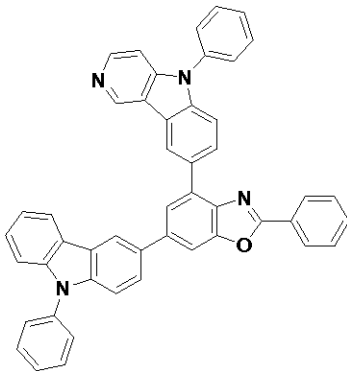
【0315】

< 2 - フェニル - 6 - (9 - フェニル - [9 H] - カルバゾール - 3 - イル) - 4 - (5 - フェニル - [5 H] - ピリド [4 , 3 - b] インドール - 8 - イル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 110) の合成 >

実施例1において、2 - (4 - クロロフェニル) - 4 , 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールに代えて、6 - クロロ - 2 - フェニル - 4 - (5 - フェニル - [5 H] - ピリド [4 , 3 - b] インドール - 8 - イル) - ベンゾオキサゾールを用い、3 - ピリジルボロン酸に代えて、9 - フェニル - [9 H] - カルバゾール - 3 - イル - ボロン酸を用い、同様の条件で反応を行うことによって、2 - フェニル - 6 - (9 - フェニル - [9 H] - カルバゾール - 3 - イル) - 4 - (5 - フェニル - [5 H] - ピリド [4 , 3 - b] インドール - 8 - イル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 110) の黄色粉体 2.9 g (収率 50%) を得た。

【0316】

【化218】



(1 - 110)

【0317】

得られた黄色粉体についてNMRを使用して構造を同定した。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) で以下の30個の水素のシグナルを検出した。

(ppm) = 9.56 (1H)、9.04 (1H)、8.59 (1H)、8.53 (1H)、8.48 (1H)、8.45 (1H)、8.36 (1H)、8.26 (2H)、8.05 (1H)、7.93 (2H)、7.88 - 7.43 (16H)、7.36 (2H)。

【実施例17】

【0318】

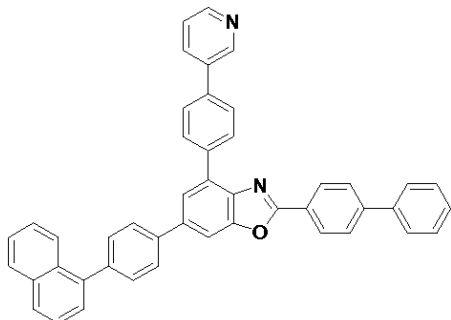
< 6 - (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - 2 - (ビフェニル - 4 - イル) - 4 - (4 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 112) の合成 >

実施例1において、2 - (4 - クロロフェニル) - 4 , 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールに代えて、2 - (4 - クロロフェニル) - 6 - (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - 4 - (4 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールを用い、3 - ピリジルボロン酸に代えて、フェニルボロン酸を用い、ビス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) に代えて、トリス (ジベンジリデン

アセトン)パラジウム(0)を用い、同様の条件で反応を行うことによって、6-(4-ナフタレン-1-イル-フェニル)-2-(ビフェニル-4-イル)-4-(4-ピリジン-3-イル-フェニル)-ベンゾオキサゾール(化合物1-112)の白色粉体4.8g(収率56%)を得た。

【0319】

【化219】



10

(1-112)

【0320】

得られた白色粉体についてNMRを使用して構造を同定した。

¹H-NMR(CDC1₃)で以下の30個の水素のシグナルを検出した。

(ppm) = 9.00(1H)、8.66(1H)、8.45(2H)、8.33(2H)、8.07-7.78(12H)、7.70(4H)、7.63-7.40(8H)。

20

【実施例18】

【0321】

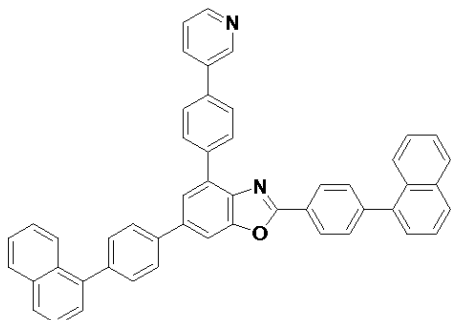
<2,6-ビス(4-ナフタレン-1-イル-フェニル)-4-(4-ピリジン-3-イル-フェニル)-ベンゾオキサゾール(化合物1-113)の合成>

実施例1において、2-(4-クロロフェニル)-4,6-ビス(4-ナフタレン-1-イル-フェニル)-ベンゾオキサゾールに代えて、2-(4-クロロフェニル)-6-(4-ナフタレン-1-イル-フェニル)-4-(4-ピリジン-3-イル-フェニル)-ベンゾオキサゾールを用い、3-ピリジルボロン酸に代えて、1-ナフタレンボロン酸を用い、ビス(ジベンジリデンアセトン)パラジウム(0)に代えて、トリス(ジベンジリデンアセトン)パラジウム(0)を用い、同様の条件で反応を行うことによって、2,6-ビス(4-ナフタレン-1-イル-フェニル)-4-(4-ピリジン-3-イル-フェニル)-ベンゾオキサゾール(化合物1-113)の白色粉体6.1g(収率66%)を得た。

30

【0322】

【化220】



40

(1-113)

【0323】

得られた白色粉体についてNMRを使用して構造を同定した。

50

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) で以下の 32 個の水素のシグナルを検出した。

(ppm) = 9.01 (1H)、8.66 (1H)、8.51 (2H)、8.35 (2H)、8.09 - 7.80 (13H)、7.73 (2H)、7.69 (2H)、7.64 - 7.40 (9H)。

【実施例 19】

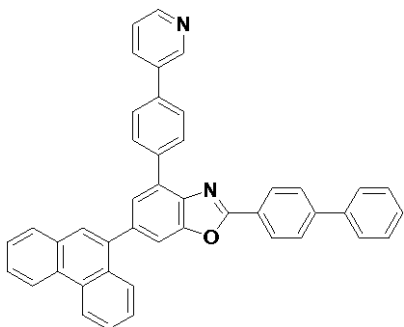
【0324】

< 2 - (ピフェニル - 4 - イル) - 6 - (フェナンスレン - 9 - イル) - 4 - (4 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 118) の合成 >

実施例 1 において、2 - (4 - クロロフェニル) - 4, 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールに代えて、2 - (4 - クロロフェニル) - 6 - (フェナンスレン - 9 - イル) - 4 - (4 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールを用い、3 - ピリジルボロン酸に代えて、フェニルボロン酸を用い、ビス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) に代えて、トリス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) を用い、同様の条件で反応を行うことによって、2 - (ピフェニル - 4 - イル) - 6 - (フェナンスレン - 9 - イル) - 4 - (4 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 118) の白色粉体 4.3 g (収率 67%) を得た。

【0325】

【化 221】



(1 - 118)

【0326】

得られた白色粉体について NMR を使用して構造を同定した。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) で以下の 28 個の水素のシグナルを検出した。

(ppm) = 8.98 (1H)、8.86 (1H)、8.80 (1H)、8.64 (1H)、8.46 (2H)、8.32 (2H)、8.07 (1H)、7.98 (2H)、7.88 - 7.57 (13H)、7.52 (2H)、7.44 (2H)。

【実施例 20】

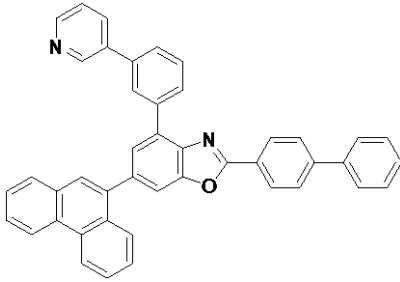
【0327】

< 2 - (ピフェニル - 4 - イル) - 6 - (フェナンスレン - 9 - イル) - 4 - (3 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 119) の合成 >

実施例 1 において、2 - (4 - クロロフェニル) - 4, 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールに代えて、2 - (4 - クロロフェニル) - 6 - (フェナンスレン - 9 - イル) - 4 - (3 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールを用い、3 - ピリジルボロン酸に代えて、フェニルボロン酸を用い、ビス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) に代えて、トリス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) を用い、同様の条件で反応を行うことによって、2 - (ピフェニル - 4 - イル) - 6 - (フェナンスレン - 9 - イル) - 4 - (3 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 119) の白色粉体 3.0 g (収率 35%) を得た。

【0328】

【化 2 2 2】



(1 - 1 1 9)

10

【 0 3 2 9 】

得られた白色粉体についてNMRを使用して構造を同定した。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) で以下の 28 個の水素のシグナルを検出した。

(ppm) = 9.02 (1H)、8.85 (1H)、8.79 (1H)、8.64 (1H)、8.45 (2H)、8.43 (1H)、8.19 (1H)、8.07 (1H)、8.02 (1H)、7.97 (1H)、7.89 - 7.78 (5H)、7.78 - 7.39 (12H)。

【実施例 2 1】

【 0 3 3 0 】

< 6 - (フェナンスレン - 9 - イル) - 4 - (4 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - 2 - ([1, 1'-4', 1'']ターフェニル - 4 - イル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 120) の合成 >

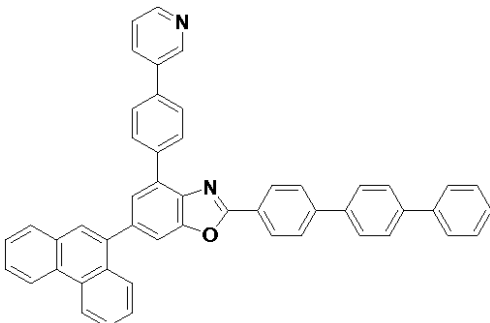
20

実施例 1 において、2 - (4 - クロロフェニル) - 4, 6 - ビス(4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールに代えて、2 - (4 - クロロフェニル) - 6 - (フェナンスレン - 9 - イル) - 4 - (4 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールを用い、3 - ピリジルボロン酸に代えて、4 - ビフェニルボロン酸を用い、ビス(ジベンジリデンアセトン)パラジウム(0)に代えて、トリス(ジベンジリデンアセトン)パラジウム(0)を用い、同様の条件で反応を行うことによって、6 - (フェナンスレン - 9 - イル) - 4 - (4 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - 2 - ([1, 1'-4', 1'']ターフェニル - 4 - イル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 120) の白色粉体 2.8 g (収率 36%) を得た。

30

【 0 3 3 1 】

【化 2 2 3】



40

(1 - 1 2 0)

【 0 3 3 2 】

得られた白色粉体についてNMRを使用して構造を同定した。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) で以下の 32 個の水素のシグナルを検出した。

(ppm) = 8.98 (1H)、8.86 (1H)、8.80 (1H)、8.64 (1H)、8.48 (2H)、8.33 (2H)、8.08 (1H)、7.98 (2H)、7.90 - 7.57 (17H)、7.51 (2H)、7.41 (2H)。

【実施例 2 2】

50

【0333】

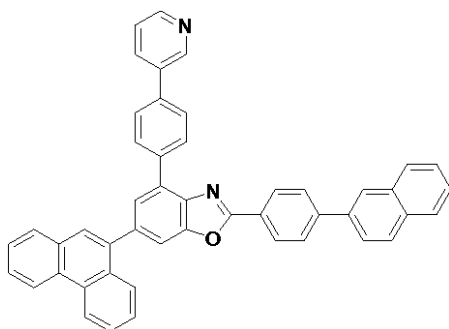
< 2 - (4 - ナフタレン - 2 - イル - フェニル) - 6 - (フェナンスレン - 9 - イル) - 4 - (4 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 122) の合成 >

実施例 1 において、2 - (4 - クロロフェニル) - 4, 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールに代えて、2 - (4 - クロロフェニル) - 6 - (フェナンスレン - 9 - イル) - 4 - (4 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールを用い、3 - ピリジルボロン酸に代えて、2 - ナフタレンボロン酸を用い、ビス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) に代えて、トリス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) を用い、同様の条件で反応を行うことによって、2 - (4 - ナフタレン - 2 - イル - フェニル) - 6 - (フェナンスレン - 9 - イル) - 4 - (4 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 122) の白色粉体 3.0 g (収率 43%) を得た。

10

【0334】

【化224】



20

(1 - 122)

【0335】

得られた白色粉体について NMR を使用して構造を同定した。

¹H - NMR (CDCl₃) で以下の 30 個の水素のシグナルを検出した。

(ppm) = 8.98 (1H)、8.86 (1H)、8.80 (1H)、8.65 (1H)、8.51 (2H)、8.33 (2H)、8.17 (1H)、8.08 (1H)、8.03 - 7.90 (7H)、7.89 - 7.51 (12H)、7.42 (1H)。

30

【実施例 23】

【0336】

< 2 - フェニル - 4 - (4 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - 6 - (トリフェニレン - 2 - イル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 125) の合成 >

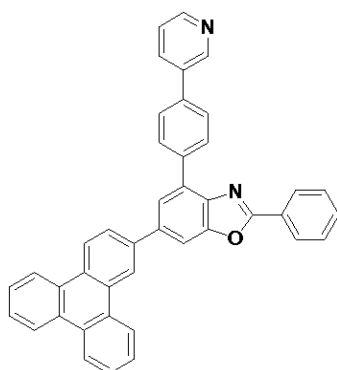
実施例 1 において、2 - (4 - クロロフェニル) - 4, 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールに代えて、6 - クロロ - 2 - フェニル - 4 - (4 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールを用い、3 - ピリジルボロン酸に代えて、2 - トリフェニレンボロン酸を用い、ビス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) に代えて、トリス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) を用い、同様の条件で反応を行うことによって、2 - フェニル - 4 - (4 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - 6 - (トリフェニレン - 2 - イル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 125) の白色粉体 5.9 g (収率 28%) を得た。

40

【0337】

50

【化 2 2 5】



10

(1 - 1 2 5)

【 0 3 3 8 】

得られた白色粉体についてNMRを使用して構造を同定した。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) で以下の 26 個の水素のシグナルを検出した。

(ppm) = 8 . 9 9 (2 H)、8 . 8 5 - 8 . 6 3 (6 H)、8 . 3 5 (2 H)、
8 . 3 3 (2 H)、8 . 0 8 - 7 . 9 7 (4 H)、7 . 8 3 (2 H)、7 . 7 2 (4 H)、
7 . 5 9 (3 H)、7 . 4 4 (1 H)。

【実施例 2 4】

20

【 0 3 3 9 】

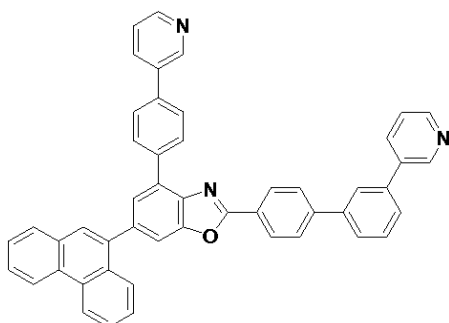
< 6 - (フェナンスレン - 9 - イル) - 2 - { 3 ' - (ピリジン - 3 - イル) - ピフェニル - 4 - イル } - 4 - (4 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 1 3 1) の合成 >

実施例 1 において、2 - (4 - クロロフェニル) - 4 , 6 - ビス (4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールに代えて、2 - (4 - クロロフェニル) - 6 - (フェナンスレン - 9 - イル) - 4 - (4 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾールを用い、3 - ピリジルボロン酸に代えて、3 - (ピリジン - 3 - イル) フェニルボロン酸を用い、ビス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) に代えて、トリス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0) を用い、同様の条件で反応を行うことによって、6 - (フェナンスレン - 9 - イル) - 2 - { 3 ' - (ピリジン - 3 - イル) - ピフェニル - 4 - イル } - 4 - (4 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾオキサゾール (化合物 1 - 1 3 1) の黄色粉体 3 . 4 g (収率 4 3 %) を得た。

30

【 0 3 4 0 】

【化 2 2 6】



40

(1 - 1 3 1)

【 0 3 4 1 】

得られた黄色粉体についてNMRを使用して構造を同定した。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) で以下の 31 個の水素のシグナルを検出した。

(ppm) = 9 . 0 4 (1 H)、8 . 6 7 (1 H)、8 . 4 7 (2 H)、8 . 1 5 (4 H)、8 . 0 8 - 7 . 7 2 (1 5 H)、7 . 7 2 - 7 . 4 2 (8 H)。

50

【実施例 25】

【0342】

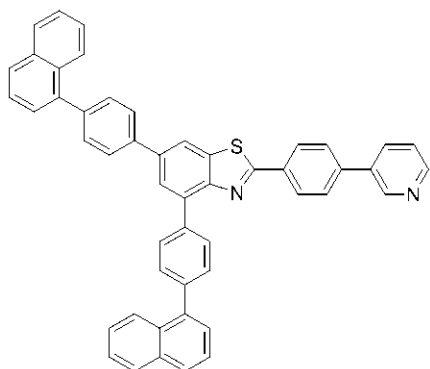
< 4, 6 - ビス(4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - 2 - (4 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾチアゾール (化合物 2 - 1) の合成 >

実施例 1 において、2 - (4 - クロロフェニル) - 4, 6 - ビス(4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾチアゾールに代えて、2 - (4 - クロロフェニル) - 4, 6 - ビス(4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾチアゾールを用い、同様の条件で反応を行うことによって、4, 6 - ビス(4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - 2 - (4 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾチアゾール (化合物 2 - 1) の黄色粉体 3.5 g (収率 21%) を得た。

10

【0343】

【化 227】



20

(2 - 1)

【0344】

得られた黄色粉体について NMR を使用して構造を同定した。

^1H - NMR (CDCl₃) で以下の 32 個の水素のシグナルを検出した。

(ppm) = 8.98 (1H)、8.68 (1H)、8.52 (2H)、8.40 - 8.25 (3H)、8.12 (1H)、8.07 - 7.69 (15H)、7.64 (9H)。

30

【実施例 26】

【0345】

< 2 - (ピフェニル - 4 - イル) - 6 - (フェナンスレン - 9 - イル) - 4 - (4 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾチアゾール (化合物 2 - 63) の合成 >

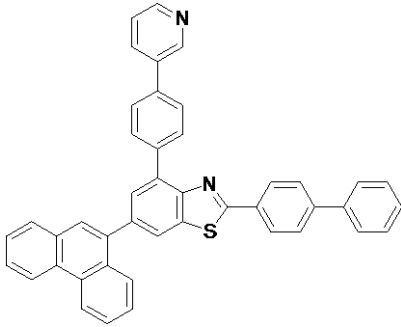
実施例 1 において、2 - (4 - クロロフェニル) - 4, 6 - ビス(4 - ナフタレン - 1 - イル - フェニル) - ベンゾチアゾールに代えて、2 - (4 - クロロフェニル) - 6 - (フェナンスレン - 9 - イル) - 4 - (4 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾチアゾールを用い、3 - ピリジルボロン酸に代えて、フェニルボロン酸を用い、ビス(ジベンジリデンアセトン)パラジウム(0)に代えて、トリス(ジベンジリデンアセトン)パラジウム(0)を用い、同様の条件で反応を行うことによって、2 - (ピフェニル - 4 - イル) - 6 - (フェナンスレン - 9 - イル) - 4 - (4 - ピリジン - 3 - イル - フェニル) - ベンゾチアゾール (化合物 2 - 63) の黄色粉体 2.0 g (収率 24%) を得た。

40

【0346】

50

【化 2 2 8】



10

(2 - 6 3)

【 0 3 4 7】

得られた黄色粉体についてNMRを使用して構造を同定した。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) で以下の 28 個の水素のシグナルを検出した。

(ppm) = 8 . 9 8 (1 H)、8 . 8 6 (1 H)、8 . 8 0 (1 H)、8 . 6 4 (1 H)、8 . 4 6 (2 H)、8 . 3 2 (2 H)、8 . 1 2 - 7 . 9 3 (4 H)、7 . 8 8 - 7 . 5 7 (1 2 H)、7 . 5 2 (2 H)、7 . 4 4 (2 H)。

【実施例 2 7】

【 0 3 4 8】

一般式 (1) で表されるベンゾアゾール化合物について、高感度示差走査熱量計 (プルカー・エイエックスエス製、DSC3100SA) によって融点とガラス転移点を測定した。

20

	融点	ガラス転移点
実施例 1 の化合物	観測されず	1 2 3
実施例 2 の化合物	2 7 7	1 1 9
実施例 3 の化合物	観測されず	1 1 7
実施例 4 の化合物	2 5 4	1 0 9
実施例 5 の化合物	観測されず	1 2 4
実施例 6 の化合物	2 7 9	1 6 4
実施例 7 の化合物	観測されず	1 1 7
実施例 8 の化合物	観測されず	1 4 8
実施例 9 の化合物	2 3 6	1 1 3
実施例 10 の化合物	2 3 5	1 3 7
実施例 11 の化合物	観測されず	8 2
実施例 12 の化合物	2 9 1	1 2 3
実施例 13 の化合物	2 4 2	1 2 1
実施例 14 の化合物	2 7 3	1 4 4
実施例 15 の化合物	2 5 4	1 3 1
実施例 16 の化合物	観測されず	1 8 0
実施例 17 の化合物	2 2 8	1 1 6
実施例 18 の化合物	観測されず	1 2 4
実施例 19 の化合物	観測されず	1 3 2
実施例 20 の化合物	観測されず	1 1 6
実施例 21 の化合物	2 6 3	1 4 4
実施例 22 の化合物	2 7 1	1 3 6
実施例 23 の化合物	2 8 2	1 2 6
実施例 24 の化合物	観測されず	1 3 3
実施例 25 の化合物	観測されず	1 1 8
実施例 26 の化合物	観測されず	1 2 5

30

40

50

【0349】

一般式(1)で表されるベンゾアゾール環構造を有する化合物は100以上のガラス転移点を有しており、薄膜状態が安定であることを示すものである。

【実施例28】

【0350】

一般式(1)で表されるベンゾアゾール環構造を有する化合物を用いて、ITO基板の上に膜厚100nmの蒸着膜を作製して、イオン化ポテンシャル測定装置(住友重機械工業株式会社製、PYS-202)によって仕事関数を測定した。

仕事関数

実施例1の化合物	6.34 eV	10
実施例2の化合物	6.40 eV	
実施例3の化合物	6.40 eV	
実施例4の化合物	6.43 eV	
実施例5の化合物	6.41 eV	
実施例6の化合物	6.38 eV	
実施例7の化合物	6.37 eV	
実施例8の化合物	6.40 eV	
実施例9の化合物	5.98 eV	
実施例10の化合物	6.33 eV	
実施例11の化合物	6.34 eV	20
実施例12の化合物	6.27 eV	
実施例13の化合物	6.46 eV	
実施例14の化合物	6.28 eV	
実施例15の化合物	6.05 eV	
実施例16の化合物	5.94 eV	
実施例17の化合物	6.30 eV	
実施例18の化合物	6.31 eV	
実施例19の化合物	6.43 eV	
実施例20の化合物	6.33 eV	
実施例21の化合物	6.36 eV	30
実施例22の化合物	6.43 eV	
実施例23の化合物	6.22 eV	
実施例24の化合物	6.41 eV	
実施例25の化合物	6.41 eV	
実施例26の化合物	6.50 eV	

【0351】

一般式(1)で表されるベンゾアゾール環構造を有する化合物はNPD、TPDなどの一般的な正孔輸送材料がもつ仕事関数5.5eVより大きい値を有しており、大きな正孔阻止能力を有している。

【実施例29】

【0352】

有機EL素子は、図1に示すように、ガラス基板1上に透明陽極2としてITO電極をあらかじめ形成したものの上に、正孔注入層3、正孔輸送層4、発光層5、正孔阻止層6、電子輸送層7、電子注入層8、陰極(アルミニウム電極)9の順に蒸着して作製した。

【0353】

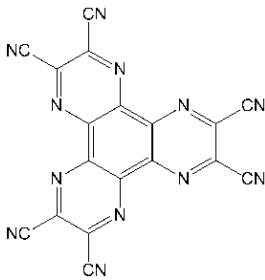
具体的には、膜厚50nmのITOを成膜したガラス基板1をイソプロピルアルコール中にて超音波洗浄を20分間行った後、200℃に加熱したホットプレート上にて10分間乾燥を行った。その後、UVオゾン処理を15分間行った後、このITO付きガラス基板を真空蒸着機内に取り付け、0.001Pa以下まで減圧した。続いて、透明陽極2を覆うように正孔注入層3として、下記構造式の化合物HIM-1を膜厚5nmとなるよう

に形成した。この正孔注入層 3 の上に、正孔輸送層 4 として下記構造式の化合物 H T M - 1 を膜厚 6 5 n m となるように形成した。この正孔輸送層 4 の上に、発光層 5 として下記構造式の化合物 E M D - 1 と下記構造式の化合物 E M H - 1 を、蒸着速度比が E M D - 1 : E M H - 1 = 5 : 9 5 となる蒸着速度で二元蒸着を行い、膜厚 2 0 n m となるように形成した。この発光層 5 の上に、正孔阻止層 6 兼電子輸送層 7 として本発明実施例 1 の化合物 (化合物 1 - 1) と下記構造式の化合物 E T M - 1 を、蒸着速度比が本発明実施例 1 の化合物 (化合物 1 - 1) : E T M - 1 = 5 0 : 5 0 となる蒸着速度で二元蒸着を行い、膜厚 3 0 n m となるように形成した。この正孔阻止層 6 兼電子輸送層 7 の上に、電子注入層 8 としてフッ化リチウムを膜厚 1 n m となるように形成した。最後に、アルミニウムを 1 0 0 n m 蒸着して陰極 9 を形成した。作製した有機 E L 素子について、大気中、常温で特性測定を行った。作製した有機 E L 素子に直流電圧を印加したときの発光特性の測定結果を表 1 にまとめて示した。

10

【 0 3 5 4 】

【 化 2 2 9 】

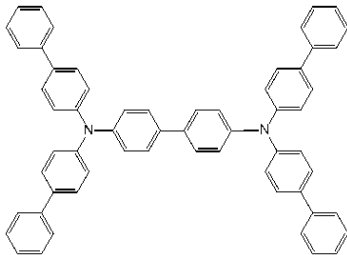


20

(H I M - 1)

【 0 3 5 5 】

【 化 2 3 0 】

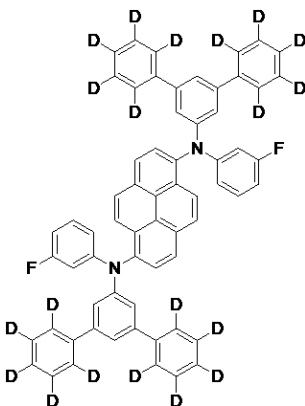


30

(H T M - 1)

【 0 3 5 6 】

【 化 2 3 1 】



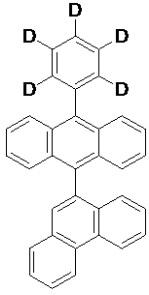
40

(E M D - 1)

【 0 3 5 7 】

50

【化 2 3 2】

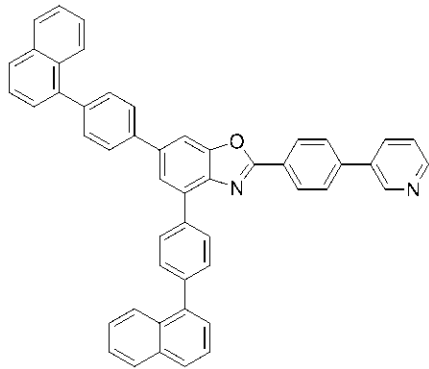


10

(E M H - 1)

【 0 3 5 8】

【化 2 3 3】

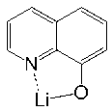


20

(1 - 1)

【 0 3 5 9】

【化 2 3 4】



30

(E T M - 1)

【実施例 3 0】

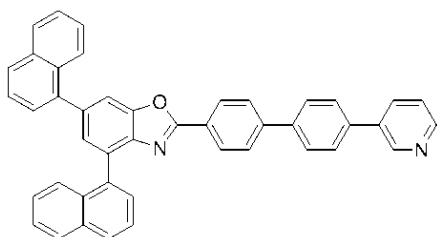
【 0 3 6 0】

実施例 29 において、正孔阻止層 6 兼電子輸送層 7 の材料として本発明実施例 1 の化合物（化合物 1 - 1）に代えて本発明実施例 2 の化合物（化合物 1 - 2）を用い、蒸着速度比が本発明実施例 2 の化合物（化合物 1 - 2）：E T M - 1 = 50 : 50 となる蒸着速度で二元蒸着を行った以外は、同様の条件で有機 E L 素子を作製した。作製した有機 E L 素子について、大気中、常温で特性測定を行った。作製した有機 E L 素子に直流電圧を印加したときの発光特性の測定結果を表 1 にまとめて示した。

40

【 0 3 6 1】

【化 2 3 5】



(1 - 2)

50

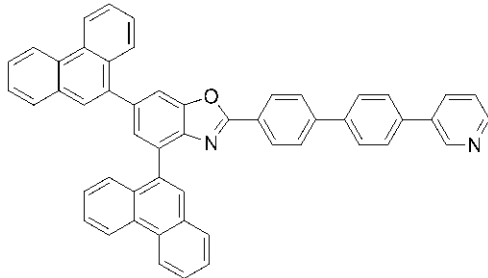
【実施例 3 1】

【0362】

実施例 29 において、正孔阻止層 6 兼電子輸送層 7 の材料として本発明実施例 1 の化合物（化合物 1 - 1）に代えて本発明実施例 6 の化合物（化合物 1 - 6）を用い、蒸着速度比が本発明実施例 6 の化合物（化合物 1 - 6）：ETM - 1 = 50 : 50 となる蒸着速度で二元蒸着を行った以外は、同様の条件で有機 EL 素子を作製した。作製した有機 EL 素子について、大気中、常温で特性測定を行った。作製した有機 EL 素子に直流電圧を印加したときの発光特性の測定結果を表 1 にまとめて示した。

【0363】

【化 2 3 6】



10

(1 - 6)

20

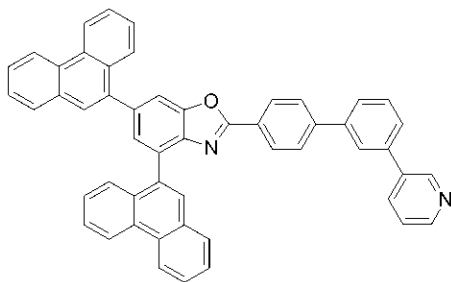
【実施例 3 2】

【0364】

実施例 29 において、正孔阻止層 6 兼電子輸送層 7 の材料として本発明実施例 1 の化合物（化合物 1 - 1）に代えて本発明実施例 8 の化合物（化合物 1 - 8）を用い、蒸着速度比が本発明実施例 8 の化合物（化合物 1 - 8）：ETM - 1 = 50 : 50 となる蒸着速度で二元蒸着を行った以外は、同様の条件で有機 EL 素子を作製した。作製した有機 EL 素子について、大気中、常温で特性測定を行った。作製した有機 EL 素子に直流電圧を印加したときの発光特性の測定結果を表 1 にまとめて示した。

【0365】

【化 2 3 7】



30

(1 - 8)

40

【実施例 3 3】

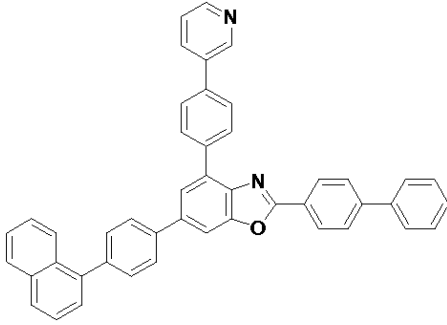
【0366】

実施例 29 において、正孔阻止層 6 兼電子輸送層 7 の材料として本発明実施例 1 の化合物（化合物 1 - 1）に代えて本発明実施例 17 の化合物（化合物 1 - 112）を用い、蒸着速度比が本発明実施例 17 の化合物（化合物 1 - 112）：ETM - 1 = 50 : 50 となる蒸着速度で二元蒸着を行った以外は、同様の条件で有機 EL 素子を作製した。作製した有機 EL 素子について、大気中、常温で特性測定を行った。作製した有機 EL 素子に直流電圧を印加したときの発光特性の測定結果を表 1 にまとめて示した。

【0367】

50

【化 2 3 8】



10

(1 - 1 1 2)

【実施例 3 4】

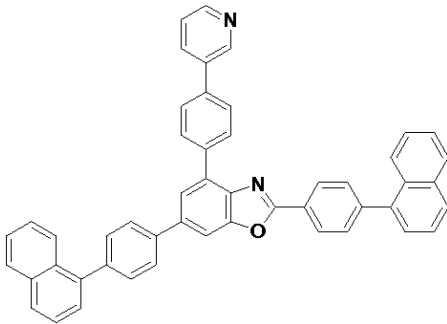
【 0 3 6 8】

実施例 2 9 において、正孔阻止層 6 兼電子輸送層 7 の材料として本発明実施例 1 の化合物（化合物 1 - 1）に代えて本発明実施例 1 8 の化合物（化合物 1 - 1 1 3）を用い、蒸着速度比が本発明実施例 1 8 の化合物（化合物 1 - 1 1 3）：ETM - 1 = 5 0 : 5 0 となる蒸着速度で二元蒸着を行った以外は、同様の条件で有機 EL 素子を作製した。作製した有機 EL 素子について、大気中、常温で特性測定を行った。作製した有機 EL 素子に直流電圧を印加したときの発光特性の測定結果を表 1 にまとめて示した。

20

【 0 3 6 9】

【化 2 3 9】



30

(1 - 1 1 3)

【実施例 3 5】

【 0 3 7 0】

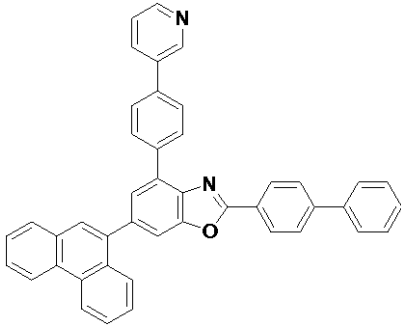
実施例 2 9 において、正孔阻止層 6 兼電子輸送層 7 の材料として本発明実施例 1 の化合物（化合物 1 - 1）に代えて本発明実施例 1 9 の化合物（化合物 1 - 1 1 8）を用い、蒸着速度比が本発明実施例 1 9 の化合物（化合物 1 - 1 1 8）：ETM - 1 = 5 0 : 5 0 となる蒸着速度で二元蒸着を行った以外は、同様の条件で有機 EL 素子を作製した。作製した有機 EL 素子について、大気中、常温で特性測定を行った。作製した有機 EL 素子に直流電圧を印加したときの発光特性の測定結果を表 1 にまとめて示した。

40

【 0 3 7 1】

50

【化 2 4 0】



10

(1 - 1 1 8)

【実施例 3 6】

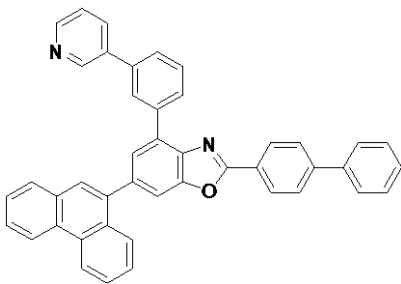
【0 3 7 2】

実施例 2 9 において、正孔阻止層 6 兼電子輸送層 7 の材料として本発明実施例 1 の化合物（化合物 1 - 1）に代えて本発明実施例 2 0 の化合物（化合物 1 - 1 1 9）を用い、蒸着速度比が本発明実施例 2 0 の化合物（化合物 1 - 1 1 9）：ETM - 1 = 5 0 : 5 0 となる蒸着速度で二元蒸着を行った以外は、同様の条件で有機 EL 素子を作製した。作製した有機 EL 素子について、大気中、常温で特性測定を行った。作製した有機 EL 素子に直流電圧を印加したときの発光特性の測定結果を表 1 にまとめて示した。

20

【0 3 7 3】

【化 2 4 1】



30

(1 - 1 1 9)

【実施例 3 7】

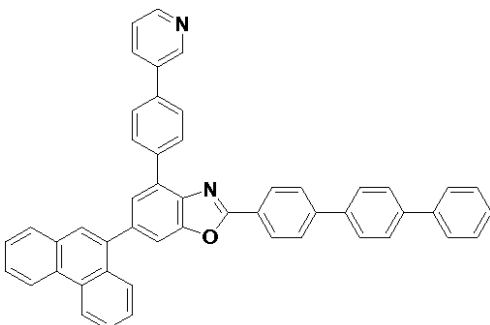
【0 3 7 4】

実施例 2 9 において、正孔阻止層 6 兼電子輸送層 7 の材料として本発明実施例 1 の化合物（化合物 1 - 1）に代えて本発明実施例 2 1 の化合物（化合物 1 - 1 2 0）を用い、蒸着速度比が本発明実施例 2 1 の化合物（化合物 1 - 1 2 0）：ETM - 1 = 5 0 : 5 0 となる蒸着速度で二元蒸着を行った以外は、同様の条件で有機 EL 素子を作製した。作製した有機 EL 素子について、大気中、常温で特性測定を行った。作製した有機 EL 素子に直流電圧を印加したときの発光特性の測定結果を表 1 にまとめて示した。

40

【0 3 7 5】

【化 2 4 2】



50

(1 - 1 2 0)

【実施例 3 8】

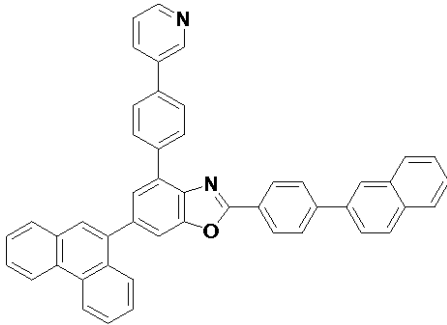
【 0 3 7 6 】

実施例 2 9 において、正孔阻止層 6 兼電子輸送層 7 の材料として本発明実施例 1 の化合物（化合物 1 - 1）に代えて本発明実施例 2 2 の化合物（化合物 1 - 1 2 2）を用い、蒸着速度比が本発明実施例 2 2 の化合物（化合物 1 - 1 2 2）：ETM - 1 = 5 0 : 5 0 となる蒸着速度で二元蒸着を行った以外は、同様の条件で有機 EL 素子を作製した。作製した有機 EL 素子について、大気中、常温で特性測定を行った。作製した有機 EL 素子に直流電圧を印加したときの発光特性の測定結果を表 1 にまとめて示した。

【 0 3 7 7 】

10

【化 2 4 3】



20

(1 - 1 2 2)

【実施例 3 9】

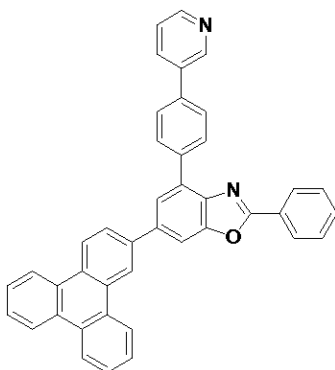
【 0 3 7 8 】

実施例 2 9 において、正孔阻止層 6 兼電子輸送層 7 の材料として本発明実施例 1 の化合物（化合物 1 - 1）に代えて本発明実施例 2 3 の化合物（化合物 1 - 1 2 5）を用い、蒸着速度比が本発明実施例 2 3 の化合物（化合物 1 - 1 2 5）：ETM - 1 = 5 0 : 5 0 となる蒸着速度で二元蒸着を行った以外は、同様の条件で有機 EL 素子を作製した。作製した有機 EL 素子について、大気中、常温で特性測定を行った。作製した有機 EL 素子に直流電圧を印加したときの発光特性の測定結果を表 1 にまとめて示した。

30

【 0 3 7 9 】

【化 2 4 4】



40

(1 - 1 2 5)

【実施例 4 0】

【 0 3 8 0 】

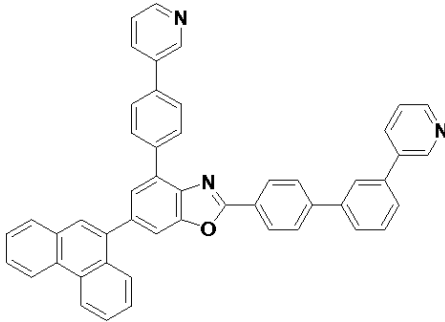
実施例 2 9 において、正孔阻止層 6 兼電子輸送層 7 の材料として本発明実施例 1 の化合物（化合物 1 - 1）に代えて本発明実施例 2 4 の化合物（化合物 1 - 1 3 1）を用い、蒸着速度比が本発明実施例 2 4 の化合物（化合物 1 - 1 3 1）：ETM - 1 = 5 0 : 5 0 となる蒸着速度で二元蒸着を行った以外は、同様の条件で有機 EL 素子を作製した。作製し

50

た有機EL素子について、大気中、常温で特性測定を行った。作製した有機EL素子に直流電圧を印加したときの発光特性の測定結果を表1にまとめて示した。

【0381】

【化245】



10

(1-131)

【実施例41】

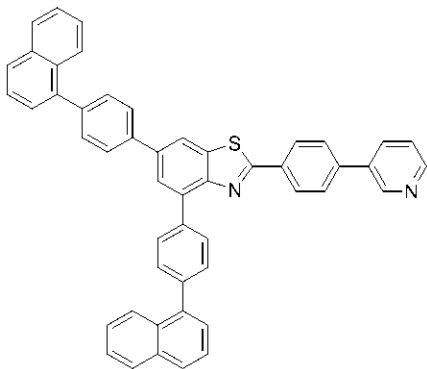
【0382】

実施例29において、正孔阻止層6兼電子輸送層7の材料として本発明実施例1の化合物(化合物1-1)に代えて本発明実施例25の化合物(化合物2-1)を用い、蒸着速度比が本発明実施例25の化合物(化合物2-1):ETM-1=50:50となる蒸着速度で二元蒸着を行った以外は、同様の条件で有機EL素子を作製した。作製した有機EL素子について、大気中、常温で特性測定を行った。作製した有機EL素子に直流電圧を印加したときの発光特性の測定結果を表1にまとめて示した。

20

【0383】

【化246】



30

(2-1)

【実施例42】

【0384】

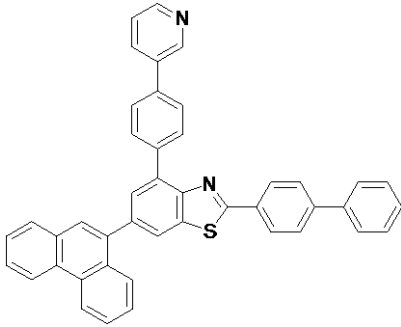
実施例29において、正孔阻止層6兼電子輸送層7の材料として本発明実施例1の化合物(化合物1-1)に代えて本発明実施例26の化合物(化合物2-63)を用い、蒸着速度比が本発明実施例26の化合物(化合物2-63):ETM-1=50:50となる蒸着速度で二元蒸着を行った以外は、同様の条件で有機EL素子を作製した。作製した有機EL素子について、大気中、常温で特性測定を行った。作製した有機EL素子に直流電圧を印加したときの発光特性の測定結果を表1にまとめて示した。

40

【0385】

50

【化 2 4 7】



10

(2 - 6 3)

【 0 3 8 6】

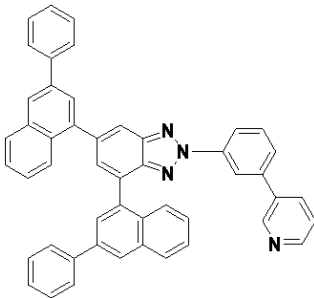
[比較例 1]

比較のために、実施例 29 において、正孔阻止層 6 兼電子輸送層 7 の材料として本発明実施例 1 の化合物 (化合物 1 - 1) に代えて、下記構造式の化合物 E T M - 2 (例えば、特許文献 3 参照) を用い、蒸着速度比が E T M - 2 : E T M - 1 = 5 0 : 5 0 となる蒸着速度で二元蒸着を行った以外は、同様の条件で有機 E L 素子を作製した。作製した有機 E L 素子について、大気中、常温で特性測定を行った。作製した有機 E L 素子に直流電圧を印加したときの発光特性の測定結果を表 1 にまとめて示した。

20

【 0 3 8 7】

【化 2 4 8】



30

(E T M - 2)

【 0 3 8 8】

実施例 29 ~ 42 および比較例 1 で作製した有機 E L 素子を用いて、素子寿命を測定した結果を表 1 にまとめて示した。素子寿命は、発光開始時の発光輝度 (初期輝度) を 2000 cd/m^2 として定電流駆動を行った時、発光輝度が 1900 cd/m^2 (初期輝度を 100% とした時の 95% に相当 : 95% 減衰) に減衰するまでの時間として測定した。

【 0 3 8 9】

40

50

【表 1】

	正孔阻止層兼 電子輸送層	電圧[V] (@10mA/cm ²)	輝度[cd/m ²] (@10mA/cm ²)	発光効率[cd/A] (@10mA/cm ²)	電力効率[lm/W] (@10mA/cm ²)	素子寿命 95%減衰
実施例29	化合物1-1/ ETM-1	3.49	999	10.00	9.02	150時間
実施例30	化合物1-2/ ETM-1	3.60	1011	10.11	8.83	118時間
実施例31	化合物1-6/ ETM-1	3.55	994	9.93	8.78	108時間
実施例32	化合物1-8/ ETM-1	3.55	800	7.98	7.04	157時間
実施例33	化合物1-112/ ETM-1	3.40	975	9.75	9.02	174時間
実施例34	化合物1-113/ ETM-1	3.32	951	9.51	9.02	122時間
実施例35	化合物1-118/ ETM-1	3.37	1006	10.06	9.37	133時間
実施例36	化合物1-119/ ETM-1	3.49	1000	10.00	9.01	162時間
実施例37	化合物1-120/ ETM-1	3.47	971	9.71	8.80	211時間
実施例38	化合物1-122/ ETM-1	3.42	977	9.77	8.97	171時間
実施例39	化合物1-125/ ETM-1	3.28	796	7.96	8.51	139時間
実施例40	化合物1-131/ ETM-1	3.40	962	9.62	8.88	147時間
実施例41	化合物2-1/ ETM-1	3.59	956	9.56	8.37	137時間
実施例42	化合物2-63/ ETM-1	3.54	838	8.38	7.43	110時間
比較例1	ETM-2/ ETM-1	3.82	795	7.94	6.53	42時間

【0390】

表 1 に示すように、電流密度 10 mA/cm^2 の電流を流したときの駆動電圧は、前記構造式の化合物 ETM-2 を用いた比較例 1 の有機 EL 素子の 3.82 V に対し、実施例 29 ~ 42 の有機 EL 素子では $3.28 \sim 3.60 \text{ V}$ と低電圧化した。また、発光効率においては、比較例 1 の有機 EL 素子の 7.94 cd/A に対し、実施例 29 ~ 42 の有機 EL 素子では $7.96 \sim 10.11 \text{ cd/A}$ と向上し、電力効率においても、比較例 1 の有機 EL 素子の 6.53 lm/W に対し、実施例 29 ~ 42 の有機 EL 素子では $7.04 \sim 9.37 \text{ lm/W}$ と大きく向上した。特に、素子寿命 (95%減衰) においては、比較例 1 の有機 EL 素子における 42 時間に対し、実施例 29 ~ 42 の有機 EL 素子では $108 \sim 211$ 時間と、大きく長寿命化している。

【実施例 43】

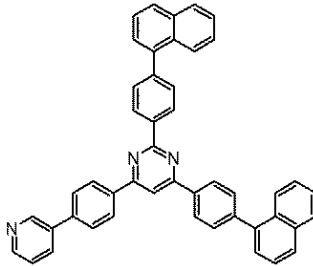
【0391】

膜厚 50 nm の ITO を成膜したガラス基板 1 をイソプロピルアルコール中にて超音波洗浄を 20 分間行った後、 200°C に加熱したホットプレート上にて 10 分間乾燥を行った。その後、UV オゾン処理を 15 分間行った後、この ITO 付きガラス基板を真空蒸着機内に取り付け、 0.001 Pa 以下まで減圧した。続いて、透明陽極 2 を覆うように正孔注入層 3 として、上記構造式の化合物 HIM-1 を膜厚 5 nm となるように形成した。この正孔注入層 3 の上に、正孔輸送層 4 として上記構造式の化合物 HTM-1 を膜厚 65 nm となるように形成した。この正孔輸送層 4 の上に、発光層 5 として上記構造式の化合物 EMD-1 と上記構造式の化合物 EMH-1 を、蒸着速度比が EMD-1 : EMH-1

= 5 : 95となる蒸着速度で二元蒸着を行い、膜厚20nmとなるように形成した。この発光層5の上に、正孔阻止層6として本発明実施例14の化合物(化合物1-107)を膜厚5nmとなるように形成した。この正孔阻止層6の上に電子輸送層7として下記構造式の化合物ETM-3と下記構造式の化合物ETM-1を、蒸着速度比がETM-3 : ETM-1 = 50 : 50となる蒸着速度で二元蒸着を行い、膜厚25nmとなるように形成した。この電子輸送層7の上に、電子注入層8としてフッ化リチウムを膜厚1nmとなるように形成した。最後に、アルミニウムを100nm蒸着して陰極9を形成した。作製した有機EL素子について、大気中、常温で特性測定を行った。作製した有機EL素子に直流電圧を印加したときの発光特性の測定結果を表2にまとめて示した。

【0392】

【化249】



(ETM-3)

【0393】

[比較例2]

比較のために、実施例43において、正孔阻止層6の材料として本発明実施例14の化合物(化合物1-107)に代えて、上記構造式の化合物ETM-2(例えば、特許文献3参照)を用いた以外は、同様の条件で有機EL素子を作製した。作製した有機EL素子について、大気中、常温で特性測定を行った。作製した有機EL素子に直流電圧を印加したときの発光特性の測定結果を表2にまとめて示した。

【0394】

実施例43および比較例2で作製した有機EL素子を用いて、素子寿命を測定した結果を表2にまとめて示した。素子寿命は、発光開始時の発光輝度(初期輝度)を2000cd/m²として定電流駆動を行った時、発光輝度が1900cd/m²(初期輝度を100%とした時の95%に相当:95%減衰)に減衰するまでの時間として測定した。

【0395】

【表2】

	正孔阻止層	電圧[V] (@10mA/cm ²)	輝度[cd/m ²] (@10mA/cm ²)	発光効率[cd/A] (@10mA/cm ²)	電力効率[lm/W] (@10mA/cm ²)	素子寿命 95%減衰
実施例43	化合物1-107	3.49	990	9.90	8.92	183時間
比較例2	ETM-2	3.60	837	8.37	7.31	44時間

【0396】

表2に示すように、電流密度10mA/cm²の電流を流したときの駆動電圧は、前記構造式の化合物ETM-2を用いた比較例2の有機EL素子の3.60Vに対し、実施例43の有機EL素子では3.49Vと低電圧化した。また、発光効率においては、比較例2の有機EL素子の8.37cd/Aに対し、実施例43の有機EL素子では9.90cd/Aと大きく向上し、電力効率においても、比較例2の有機EL素子の7.31lm/Wに対し、実施例43の有機EL素子では8.92lm/Wと大きく向上した。特に、素子寿命(95%減衰)においては、比較例2の有機EL素子における44時間に対し、実施例43の有機EL素子では183時間と、大きく長寿命化している。

【0397】

10

20

30

40

50

このように本発明の有機EL素子は、一般的な電子輸送材料として用いられている前記構造式の化合物ETM-2を用いた素子と比較して、発光効率および電力効率に優れており、長寿命の有機EL素子を実現できることが分かった。

【産業上の利用可能性】

【0398】

本発明の、特定のベンゾアゾール環構造を有する化合物は、電子の注入特性が良く、正孔阻止能力に優れており、薄膜状態が安定であるため、有機EL素子用の化合物として優れている。該化合物を用いて有機EL素子を作製することにより、高い効率を得ることができるとともに、駆動電圧を低下させることができ、耐久性を改善させることができる。例えば、家庭電化製品や照明の用途への展開が可能となった。

10

【符号の説明】

【0399】

- 1 ガラス基板
- 2 透明陽極
- 3 正孔注入層
- 4 正孔輸送層
- 5 発光層
- 6 正孔阻止層
- 7 電子輸送層
- 8 電子注入層
- 9 陰極

20

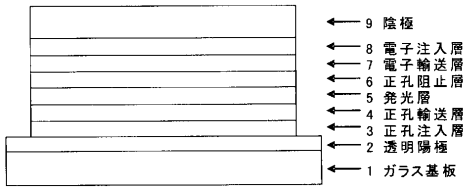
30

40

50

【図面】

【図 1】



10

20

30

40

50

フロントページの続き

(51)国際特許分類

F I

<i>C 0 9 K</i>	<i>11/06 (2006.01)</i>	<i>C 0 9 K</i>	<i>11/06</i>	<i>6 9 0</i>
<i>H 1 0 K</i>	<i>50/10 (2023.01)</i>	<i>H 0 5 B</i>	<i>33/14</i>	<i>A</i>
<i>H 1 0 K</i>	<i>50/16 (2023.01)</i>	<i>H 0 5 B</i>	<i>33/22</i>	<i>B</i>

土谷化学工業株式会社内

合議体

審判長 瀬良 聡機

審判官 赤澤 高之

審判官 野田 定文

(56)参考文献 米国特許出願公開第 2 0 0 9 - 0 1 3 0 0 7 6 号明細書

(58)調査した分野 (Int.Cl., D B名)

C 0 7 C

C A p l u s / R E G I S T R Y (S T N)